



ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIEROS INDUSTRIALES Y DE TELECOMUNICACIÓN

Titulación :

INGENIERO TÉCNICO INDUSTRIAL MECÁNICO

Título del proyecto:

**“ESTUDIO DE LA SEPARACIÓN DE MECLAS
BINARIAS EN LA COLUMNA
TERMOGRAVITACIONAL: ESTUDIO DE LA
INFLUENCIA DEL GAP Y EL ESTUDIO DE LA
INCLINACIÓN DE LA COLUMNA”**

Oscar Asurmendi Gueembe

Javier Valencia Monreal

Pamplona, 23-06-14

INDICE

1. Nomenclatura.....	3
2. Introducción y objetivos.....	4
3. Estudio de la separación de una mezcla binaria dentro de la columna gravitacional cuando el GAP de la columna varía gradualmente.....	6
• Introducción.....	6
• Formulación del problemas.....	7
• Datos experimentales.....	8
• Conclusiones.....	11
4. Estudio de la separación de una mezcla binaria cuando la columna se inclina un ángulo σ respecto a la vertical manteniendo constante el GAP.....	11
• Introducción.....	11
• Formulación del problema.....	13
• Propiedades termofísicas y parámetros dimensionales de la mezcla Agua-Etanol.....	16
• Simulación numérica.....	18
• Método experimental.....	21
• Debate de resultados.....	23
• Conclusiones.....	25
5. Coeficiente de expansión térmica (α) y coeficiente másico (β) de las sustancias binarias.....	26
6. Biografía.....	36

1.- NOMENCLATURA

- A: Radio del recinto, H/δ
C: Fracción másica
 C_0 : Fracción másica inicial
 C_p : Poder calorífico específico
D: Coeficiente de difusión isotérmico
 D_T : Coeficiente termodifusor
 D_{th} : Difusión térmica, $\frac{k}{\rho c_p}$
 \vec{g} : Vector de gravedad
 \vec{g}^* : Vector de gravedad efectiva, $\vec{g} \cdot \cos\theta$
 Gr : Número de Grashof, $(\alpha \cdot g \cdot \Delta T \cdot \delta^3)/\nu^2$
H: Longitud
K: Conductividad térmica
p: Presión
 Pr : Número de Prandtl, ν/D_{th}
 \vec{r} : Vector posición
 Sc : Número de Schmidt, ν/D
 S_T : Coeficiente Soret, D_T/D
t: Tiempo
 T_c : Temperatura pared fría
 T_h : Temperatura pared caliente
 T_m : Temperatura media, $(T_h + T_c)/2$
 t_r : Tiempo de relajación
u, w: Componentes de velocidad
 \vec{V} : Vector velocidad
x, y: Coordenadas cartesianas
 α : Coeficiente de expansión térmica
 β : Coeficiente expansión másico
 δ : Gap
 Δ : Incremento
 η : Viscosidad dinámica
 θ : Ángulo de inclinación de la columna
 ξ : Vorticidad
 ρ : Densidad
 ρ_0 : Densidad inicial
 ν : Viscosidad cinemática
 φ : Parámetro de separación, $(S_T \cdot \beta \cdot c_o \cdot (1 - c_o))/\alpha$
 ψ : Línea de corriente

2.- INTRODUCCIÓN

Es muy frecuente que nos encontremos en la naturaleza que la materia aparezca en forma inhomogénea, es decir, la composición es diferente en los distintos puntos de la misma. Estas mezclas o inhomogeneidades se transforman bien en reacciones químicas, cambios de fase, convección y difusión. Tales procesos a menudo se manifiestan combinándose entre ellos, y la difusión siempre se encuentra presente. La difusión es el transporte neto de una sustancia dentro de una fase que puede ser sólida, líquida o gaseosa, independientemente de la causa que produce este movimiento relativo. Este transporte de masas puede ser generado por gradientes térmicos, gradientes de presión o por gradientes de concentración. Si el gradiente aplicado es de tipo térmico, dando como resultado un gradiente de concentración, este fenómeno se conoce como difusión térmica, y este mismo efecto para líquidos es el *efecto Soret*. Y el efecto contrario es el *efecto Dufour*. La difusión es un proceso irreversible que se manifiesta induciendo inhomogeneidades en la composición en diversos procesos como la sedimentación, el electrotransporte y la baridifusión.

En una mezcla binaria, sometido a un gradiente térmico, normalmente el componente más denso se desplaza a la región fría y el estado estacionario final de equilibrio se alcanza cuando la diferencia de los dos flujos de materia, uno asociado al fenómeno de la termodifusión y el otro al fenómeno de la difusión mutua provocado por el gradiente de concentración, disminuye a lo largo del tiempo hasta alcanzar un valor nulo para el cual los flujos son iguales y opuestos y a esto se le denomina equilibrio de Soret. En este estado, el gradiente de concentración no varía en el transcurso del tiempo. En estas condiciones, determinamos la separación en función del coeficiente Soret de la mezcla.

Desde el punto de vista experimental la separación se manifiesta en dos geometrías diferentes.

- La separación por difusión térmica pura que se produce en un dispositivo formado por dos placas plano-paralelas horizontales isotérmicas a diferentes temperaturas siendo la placa superior la caliente y la mezcla que se encuentra entre placas presenta un gradiente de temperaturas vertical. Hay que evitar las corrientes de convección que son las responsables de que se anule el gradiente de concentración, con este fenómeno se puede llegar al equilibrio Soret, pero el tiempo para alcanzar el equilibrio es muy grande y la separación obtenida demasiado pequeña.
- Proceso termogravitacional, esta columna consta básicamente de dos placas plano-paralelas verticales isotérmicas a diferentes temperaturas, y por tanto la mezcla que se encuentra entre las placas presenta un gradiente de temperaturas horizontal. El fluido en el campo gravitatorio sufre un movimiento convectivo que en lugar de perjudicar, contribuye a que se produzca un gradiente vertical de concentración asociado al efecto Soret que genera una separación de los componentes de la mezcla.

En este caso se tiene un acoplamiento del efecto Soret horizontal y las corrientes de convección verticales dando una separación parcial de los componentes de una mezcla en los extremos de la columna. A este acoplamiento termodifusión-convección se le llama efecto termogravitacional.

Las ecuaciones termohidrodinámicas que rigen dicho efecto son las ecuaciones locales de conservación de la masa, de la cantidad de movimiento, ecuación de la energía y la ecuación de las especies. Junto con las expresiones de los flujos irreversibles, las ecuaciones de estado y las condiciones de contorno determinan totalmente el problema. Estas ecuaciones son no lineales en derivadas parciales. Así, pues, se requiere un conjunto de hipótesis simplificadoras para obtener un problema más manejable.

Inicialmente la descripción teórica de la célula termogravitacional fue dada por Furry, Jones y Onsager (FJO). Estos autores introducen un conjunto de aproximaciones obteniendo una formulación simplificada de las ecuaciones termohidrodinámicas fundamentales. Las hipótesis básicas que nos permiten un tratamiento son:

1. La velocidad de convección en el fluido es vertical
2. El gradiente de temperatura es horizontal
3. No existe dependencia de las propiedades físicas de la mezcla con la concentración.
4. El gradiente de concentración vertical no depende de la componente horizontal.

Las dos primeras hipótesis permiten desacoplar el campo de velocidades del campo de temperaturas. La tercera, desacoplo del proceso termohidrodinámico del proceso de separación. La última hipótesis permite resolver la ecuación diferencial de las especies. Resolviendo el conjunto de las ecuaciones diferenciales llegamos a una relación básica para el transporte de uno de los componentes a través de la sección transversal de la columna. Establecemos el gradiente térmico en la célula termogravitacional, el flujo de materia disminuye a lo largo del tiempo hasta que el transporte alcanza un valor nulo que corresponde al estado estacionario de equilibrio en el que el gradiente de concentración en la columna no varía en el transcurso del tiempo.

3.- Estudio de la separación de una mezcla binaria dentro de la columna gravitacional cuando el GAP de la columna varía gradualmente

3.1.- Introducción

Este trabajo consiste en estudiar experimentalmente la influencia del gap en la separación de las especies, ya que es el parámetro que más influye y a su vez es más complicado de controlar en la columna termogravitacional.

De acuerdo con las ecuaciones del tiempo de relajación, muestran que la eficiencia de una columna termogravitacional depende de la altura al cuadrado y del gap a la sexta potencia, entre las paredes. Se realizaron experimentos que ayudan a corroborar estas expresiones. Hemos construido cuatro columnas destinadas a hallar el efecto de la variación del gap. Para ello hemos realizado dos mezclas binarias. La primera de ellas es el sistema binario tolueno-hexano (51,65% - 48,33%) hemos elegido esta mezcla debido a que es muy estable y se tienen medidas muy fiables. Para cada columna medimos esta mezcla para diferentes intervalos de temperatura ($\Delta T = 5, 10, 15, 20$), de esta manera de acuerdo con la teoría nos aseguramos del buen funcionamiento de cada una de las columnas construidas. A su vez, analizamos la variación de la separación con el gap. La segunda mezcla estudiada es la mezcla agua-etanol, donde estudiamos como le afecta la variación del gap cuando la separación es positiva como negativa. Las diferencias de temperatura entre las paredes hemos tomado $\Delta T = 15^\circ$. Las concentraciones se han medido mediante un densímetro Antton. Estos tienen una precisión del orden de 10^{-6} .

La teoría predice que una columna se puede hacer el doble de eficaz con la duplicación de la longitud y 16 veces más eficaz por reducir a la mitad la anchura del espacio intermedio. Aunque los experimentos no son muy precisos, que dan una indicación de esa dependencia de las especificaciones de la columna. Los cambios en la hendidura de ancho se demuestran que tienen una fuerte influencia particularmente en la difusión térmica.

Los valores publicados del coeficiente Soret en líquidos generalmente revelan grandes desviaciones las cuales son debidas a desviaciones del comportamiento ideal de la columna por defectos de construcción con la consecuente perturbación en la figura del flujo, o la influencia de los espacios no activos, corrientes parásitas o pequeños reservorios en los extremos de la columna o debido a otras causas. Por ello, las dificultades anteriormente mencionadas se han tenido en cuenta a la hora de construir las 4 columnas que hemos utilizado para el estudio de la influencia del gap en la separación. Se ha prestado especial atención en la elección en las placas que conforman la célula termogravitacional, así como la construcción de los separadores entre placas y la distancia de las tomas respecto a los extremos a fin de minimizar los efectos de borde. Si la columna utilizada posee una geometría perfecta, el método termogravitacional es una técnica que suministra valores precisos del coeficiente Soret tanto en la separación positiva como negativa. Utilizando estas columnas, se obtiene resultados validos del coeficiente Soret de diferentes mezclas de líquidos orgánicos incluso en el caso de mezclas con valores negativos de este coeficiente, es decir, cuando el componente más

denso asciende por la pared caliente y se enriquece en la parte superior, contrariamente a lo que sucede habitualmente, Bou-Ali et al.(*)).

3.2.- Formulación del problema

De acuerdo con la teoría del efecto termogravitacional, la separación estacionaria de las especies entre los extremos de la columna, Δc_∞ viene dada por:

$$\frac{\Delta c_\infty}{c_0(1 - c_0)} = \Psi \frac{D_T \nu}{\alpha}$$

Donde c_0 es la concentración inicial en la fracción de masa, St el coeficiente Soret, ν la viscosidad, D_T el coeficiente de difusión térmica, α el coeficiente de expansión térmica y Ψ un factor relacionado con las características geométricas de la columna según la expresión:

$$\Psi = \frac{504 \Delta y}{g \delta^4}$$

Donde Δy es la distancia entre las tomas de la muestra, g es la aceleración de la gravedad, y δ es el gap o distancia entre placas.

El valor de la constante Ψ es, para las columnas utilizadas de $\Psi =$

$$\Psi = \left(\frac{504 \Delta y}{g \delta^4} \right) = \left(504 \times \frac{46}{981 \times (0,1)^4} \right) = 236330 \text{ s}^2 \text{ cm}^{-4}$$

$$\Psi = \left(\frac{504 \Delta y}{g \delta^4} \right) = \left(504 \times \frac{46}{981 \times (0,14)^4} \right) = 61519 \text{ s}^2 \text{ cm}^{-4}$$

$$\Psi = \left(\frac{504 \Delta y}{g \delta^4} \right) = \left(504 \times \frac{46}{981 \times (0,16)^4} \right) = 36061 \text{ s}^2 \text{ cm}^{-4}$$

$$\Psi = \left(\frac{504 \Delta y}{g \delta^4} \right) = \left(504 \times \frac{46}{981 \times (0,18)^4} \right) = 22513 \text{ s}^2 \text{ cm}^{-4}$$

Además de la separación, otra variable a tener en cuenta es el tiempo de relajación del proceso. De acuerdo con la teoría este viene dado por:

$$t_r = \frac{9! L^2}{(\pi \Delta T g)^2 \delta^6} \left(\frac{\nu}{\alpha} \right) D$$

Donde ΔT es la diferencia de temperaturas entre las paredes de la columna y L es la longitud total de la misma.

Las ecuaciones anteriores muestran tanto la separación como el tiempo de relajación aumenta con la longitud de la columna pero decrecen fuertemente con la anchura del gap. De hecho la separación aumenta linealmente con la longitud de la columna y disminuye fuertemente con el gap.

Por tanto no es posible obtener separaciones altas en tiempos cortos, En el diseño de las columnas hemos elegido una longitud y unas anchuras de gap lo suficientemente grandes como para que el tiempo de relajación sea pequeño y, al mismo tiempo, la separación sea grande para poder ser medida con precisión.

El tiempo de relajación del fenómeno es, de acuerdo con su ecuación inversamente proporcional al cuadrado de ΔT . Por tanto, el tiempo de operación puede reducirse considerablemente cuando empleamos valores de ΔT suficientemente altos, sin que sobrepasen los valores que determinan el rango de validez de la teoría FJO.

3.3.- Datos experimentales

Teniendo en cuenta estos criterios hemos diseñado y construido 4 columnas de difusión térmica de tipo Clusius-Dickel.

Hemos diseñado y construido estas 5 columnas con el objetivo de analizar la influencia del gap en la separación. Las características geométricas de las 4 columnas son las siguientes:

H= 58,6cm= 0,586m (Altura)

T= 46cm= 0,46m (Tomas)

A= 3,6cm= 0,036m (Anchura)

δ = 1mm; 1,4mm; 1,6mm; 1,8mm

Para determinar la separación entre las tomas superiores e inferiores de las columnas hemos utilizado un densímetro ANTON con una precisión de 10^{-6} . Del valor de la diferencia de densidades entre las tomas, Δc_{∞} obtenemos la separación de acuerdo con:

$$\Delta \rho_{\infty} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right)_T \Delta c_{\infty}$$

Donde la derivada $\left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right)_T$ a la concentración requerida y a la temperatura de 25°C se determina a partir de la curva experimental $\rho = \rho(c)$. Las separaciones que se obtienen son siempre suficientemente pequeñas como para que esta aproximación pueda utilizarse.

Sistema Tolueno-Hexano (0,5167-0,4833) a T= 25°C

$\alpha = 1,3 \times 10^{-3} \text{K}^{-1}$

$\nu = 0,497 \times 10^{-2} \text{cm}^2/\text{s} = 0,497 \times 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$

$D = 2,76 \times 10^{-5} (\text{cm}^2/\text{s}) (\text{Zhang}) = 2,76 \times 10^{-9} (\text{m}^2/\text{s}) (\text{Zhang})$

$D_T = 1,37 \times 10^{-7} (\text{cm}^2/(\text{sK}^{-1})) = 1,37 \times 10^{-11} (\text{m}^2/(\text{sK}^{-1}))$

$S_T = (D_T/D) = 1,37 \times 10^{-7} / 2,76 \times 10^{-5} = 4,9638 \times 10^{-3}$

- $\delta = 1 \text{mm}$

$$\alpha = - \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,p} = 1,3 \times 10^{-3} \text{K}^{-1}$$

$$G_r = \frac{\alpha \times g^* \times \Delta T \times \delta^3}{\nu^2} = 774,45$$

$$P_r = \frac{\nu \times \rho \times c_p}{k} = 5,3697$$

$$S_c = \frac{\nu}{D} = 180,07$$

$$H = 586 \text{mm}; G_r = 774,45; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial \rho} = 4,82$$

Teórico:

$$\Delta c_{\infty} = 3,0911 \times 10^{-2}$$

Experimental

- $\Delta T = 5 \rightarrow \Delta \rho = 0,006302$
 - $\Delta T = 10 \rightarrow \Delta \rho = 0,006350$
 - $\Delta T = 15 \rightarrow \Delta \rho = 0,006338$
 - $\Delta T = 20 \rightarrow \Delta \rho = 0,006317$
- $$\Delta c_{\infty} = 3,0495 \times 10^{-2} (\text{Error} = 1,7\%)$$

- $\delta = 1,4\text{mm}$

$$H = 418,57\text{mm}; G_r = 2125,1; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 4,82$$

Teórico:

$$\Delta c_{\infty} = 8,0463 \times 10^{-3}$$

Experimental

- $\Delta T = 5 \rightarrow \Delta \rho = 0,001668$
 - $\Delta T = 10 \rightarrow \Delta \rho = 0,001654$
 - $\Delta T = 15 \rightarrow \Delta \rho = 0,001655$
 - $\Delta T = 20 \rightarrow \Delta \rho = 0,001663$
- $$\Delta c_{\infty} = 7,9997 \times 10^{-3} (\text{Error} = 0,05\%)$$

- $\delta = 1,6\text{mm}$

$$H = 366,25\text{mm}; G_r = 3172,1; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 4,82$$

Teórico:

$$\Delta c_{\infty} = 4,7166 \times 10^{-3}$$

Experimental

- $\Delta T = 5 \rightarrow \Delta \rho = 0,000998$
 - $\Delta T = 10 \rightarrow \Delta \rho = 0,000982$
 - $\Delta T = 20 \rightarrow \Delta \rho = 0,000960$
- $$\Delta c_{\infty} = 4,7236 \times 10^{-3} (\text{Error} = -0,1\%)$$

- $\delta = 1,8\text{mm}$

$$H = 325,56\text{mm}; G_r = 774,45; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 4,82$$

Teórico:

$$\Delta c_{\infty} = 2,9445 \times 10^{-3}$$

Experimental

- $\Delta T = 5 \rightarrow \Delta \rho = 0,000598$
 - $\Delta T = 10 \rightarrow \Delta \rho = 0,000606$
 - $\Delta T = 15 \rightarrow \Delta \rho = 0,000615$
 - $\Delta T = 20 \rightarrow \Delta \rho = 0,000600$
- $$\Delta c_{\infty} = 2,9149 \times 10^{-3} (\text{Error} = 1\%)$$

δ (mm)	$\Delta c_{\infty}^{\text{teórico}}$	$\Delta c_{\infty}^{\text{experimental}}$	Error (%)
1	$3,0911 \times 10^{-2}$	$3,0495 \times 10^{-2}$	1.3
1,4	$8,0463 \times 10^{-3}$	$7,9997 \times 10^{-3}$	0,05
1,6	$4,7166 \times 10^{-3}$	$4,7236 \times 10^{-3}$	0,1
1,8	$2,9445 \times 10^{-3}$	$2,9149 \times 10^{-3}$	1

Sistema Agua-Etanol (0,6088-0,3912) a $T = 25^{\circ}\text{C}$

$$\alpha = 0,795 \times 10^{-3} \text{K}^{-1}$$

$$\nu = 2,43 \times 10^{-2} \text{cm}^2/\text{s} = 2,43 \times 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$$

$$D = 4,55 \times 10^{-6} (\text{cm}^2/\text{s}) (\text{Zhang}) = 4,55 \times 10^{-10} (\text{m}^2/\text{s}) (\text{Zhang})$$

$$D_T = 1,46 \times 10^{-8} (\text{cm}^2/(\text{sK}^{-1})) = 1,46 \times 10^{-12} (\text{m}^2/(\text{sK}^{-1}))$$

$$S_T = (D_T/D) = 1,46 \times 10^{-8} / 4,55 \times 10^{-6} = 3,2088 \times 10^{-3}$$

- $\delta = 1\text{mm}$
 $A = 586\text{mm}; G_r = 774,45; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 5,09$
 Teórico:
 $\Delta c_{\infty} = 2,5118 \times 10^{-2}$
 Experimental
 $\Delta c_{\infty} = 2,5872 \times 10^{-2} (\text{Error} = -3,0018\%)$
- $\delta = 1,4\text{mm}$
 $A = 418,57\text{mm}; G_r = 54,362; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 5,09$
 Teórico:
 $\Delta c_{\infty} = 6,5384 \times 10^{-3}$
 Experimental
 $\Delta c_{\infty} = 6,1233 \times 10^{-3} (\text{Error} = 6,3\%)$
- $\delta = 1,6\text{mm}$
 $A = 366,25\text{mm}; G_r = 64,918; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 5,09$
 Teórico:
 $\Delta c_{\infty} = 3,8327 \times 10^{-3}$
 Experimental
 $\Delta c_{\infty} = 3,6139 \times 10^{-3} (\text{Error} = 5,7088\%)$
- $\delta = 1,8\text{mm}$
 $A = 325,56\text{mm}; G_r = 77,027; P_r = 5,3697; S_c = 180,07; \frac{\partial c}{\partial p} = 5,09$
 Teórico:
 $\Delta c_{\infty} = 2,3927 \times 10^{-3}$
 Experimental
 $\Delta c_{\infty} = 2,27011 \times 10^{-3} (\text{Error} = 5,1236\%)$

$\delta \text{ (mm)}$	$\Delta c_{\infty}^{\text{teórico}}$	$\Delta c_{\infty}^{\text{experimental}}$	Error (%)
1	$2,5118 \times 10^{-2}$	$2,5872 \times 10^{-2}$	-3,0018
1,4	$6,5384 \times 10^{-3}$	$6,1233 \times 10^{-3}$	6,3
1,6	$3,8327 \times 10^{-3}$	$3,6139 \times 10^{-3}$	5,7088
1,8	$2,3927 \times 10^{-3}$	$2,27011 \times 10^{-3}$	5,1236

3.4.- Conclusiones

Como podemos ver en las tablas de la resolución de las muestras en la mezcla binaria de Tolueno – Hexano el error más grande cometido es de 1.3%, así que es muy bajo, y coincide con una separación de gap de 1 mm, en esta medida el incremento de concentración es de $3,0495 \times 10^{-2}$ por lo que es en donde más se nos separa la mezcla. Donde menos se nos separa es cuando el gap es de 1.8 y en esa apertura el incremento de concentración es de $2,9445 \times 10^{-3}$, con esto podemos decir que la geometría y la construcción de la columna es muy buena.

Para la segunda muestra que hemos realizado, Agua-etanol el error más grande cometido es de un 6.3% y ha ocurrido cuando el gap era de 1.4, en esta apertura el incremento de concentración es de $6,1233 \times 10^{-3}$. Como es lógico cuando más se nos ha separado es cuando el gap era lo mínimo posible y esto ha pasado cuando el gap era de uno y nos ha dado un incremento de $2,5872 \times 10^{-2}$.

Para finalizar hemos intentado hacer los negativos pero tras muchos intentos no lo hemos conseguido, sea bien a que el tiempo de relajación no es el apropiado o a que se producía cualquier tipo de perturbación dentro de la columna que hacía que el componente más denso por la propia gravedad cayese abajo. Entonces el incremento de concentración que obteníamos al sacar la muestra era 0.

4.- Estudio de la separación de una mezcla binaria cuando la columna se inclina un ángulo σ respecto a la vertical manteniendo constante el GAP

Este proyecto contiene el estudio del comportamiento de una mezcla binaria de Agua-Etanol (39.12% Etanol con una temperatura media de 25°C) con una simulación numérica y experimental, para diferentes grados de inclinación de la columna termogravitacional. El grado de inclinación varía entre $\theta = 0^\circ$, con la columna vertical, y $\theta = 88^\circ$, éste es el grado de inclinación máximo de la columna. Nosotros obtenemos el gradiente de temperatura, líneas de corriente y perfiles de concentración; así como el perfil de velocidad, tanto el horizontal como el vertical, y las concentraciones. Ello es un régimen conductivo, donde la separación de la sustancias con un ángulo $\theta = 88^\circ$, aumenta hasta un 93.43% comparando con la columna vertical, $\theta = 0^\circ$. Por otra parte, el tiempo de relajación también incrementa un 99.88% comparado con la columna en posición vertical.

4.1.- INTRODUCCIÓN

La difusión térmica adquirió un significado práctico gracias a los trabajos de Clasius-Dickel [1,2], quienes propusieron intensificar el efecto de separación mediante flujos convectivos en la columna termogravitacional. Así obtuvieron un acoplamiento del

efecto Soret horizontal y las corrientes de convección verticales dando una separación parcial de los componentes de la mezcla binaria en los extremos de la columna. A este acoplamiento termodifusión-convección se le denomina efecto termogravitacional. Esta separación de los componentes de la mezcla, entre los extremos de la columna se incrementa de forma importante inclinando la columna un ángulo θ . Este efecto fue estudiado por Platten [3] desde el punto de vista teórico y experimental. Se observa que esta separación se incrementa a medida que el ángulo θ aumenta. Nuestro trabajo lo hemos realizado de forma análoga que además extienda el estudio de la resolución del problema a través de la simulación numérica. Nosotros hemos archivado la no dimensionalización de las ecuaciones de continuidad, la ecuación de Navier-stokes, la ecuación de la energía y la ecuación del balance de masas del componente más ligero para el proceso de segregación en la columna termogravitacional sujetas en la aproximación de Bousinesque, utilizando la anotación vectorial.

La gravedad depende del ángulo θ y se convierte en $g^*=g*\cos\theta$ donde nosotros le llamaremos gravedad efectiva en la columna termogravitacional. Para discretizar las ecuaciones, nosotros hemos utilizado el método de elementos finitos, donde involucra la transformación de las ecuaciones diferenciales extendido a todo el dominio cuando se obtiene un grupo de ecuaciones algebraicas cuando transformamos el dominio continuo en un dominio discreto, y convertimos las derivadas en un cociente de cantidades finitas. Por lo tanto, las ecuaciones diferenciales son solo un resultado en ciertos puntos del dominio, conocidos como nodos. Cada nodo es el centro de la región y una propiedad del fluido será una medida del valor promedio de la región. Estas ecuaciones algebraicas se han resuelto con el método ADI (Alternating Direction Implicit) y el resultado de las ecuaciones se resolvió con el algoritmo de Thomas (TDMA). La simulación numérica debe de ser evaluada de acuerdo a la precisión, convergencia y estabilidad. El código numérico está validado por el punto de referencia propuesto por Vahl Dans [4,5]. Para la simulación numérica, nosotros hemos encontrado que al aumentar el ángulo de inclinación de la columna, el número de Grashof decrece, y esto conduce a un incremento en el tiempo de relajación y una separación en la mezcla binaria. Estos resultados coinciden con Platten et al [3]. Además, nosotros hemos obtenido el gradiente de temperaturas, líneas de corriente y líneas de concentración, la variación de los perfiles de velocidad y la concentración en el centro de la columna, analizando la influencia cuando el ángulo de inclinación varía. Los valores de la separación estacionaria obtenidos con la teoría coinciden con nuestros valores obtenidos con la simulación numérica, con una desviación inferior al 1% en todos los casos. Esta separación numérica está comparada con los resultados experimentales de la mezcla Agua-Etanol con una concentración de masa del 39.12% de etanol y una temperatura media de 25°C en el estado estacionario. El incremento de temperatura entre las paredes es $\Delta T= 15^\circ\text{C}$, y en este caso, nosotros hemos decidido que el tiempo de relajación en relación a incrementos más bajos, y el problema es más operacional con el fin de alcanzar el estado estacionario. Por otra parte, la pared funciona correctamente a esta temperatura, y produce valores que coincide con los teóricos y la simulación numérica. Nosotros también presentamos la comparación entre los valores obtenidos en la simulación numérica y aquellos obtenidos de forma experimental y en ambos casos los resultados son casi constantes. En todos los casos, nosotros una desviación inferior al 5%.

4.2.- FORMULACIÓN DEL PROBLEMA

Consideramos un campo gravitatorio \vec{g} , una capa de fluido binaria entre dos paredes verticales isotermas y dos paredes horizontales adiabáticas, Figura 1.

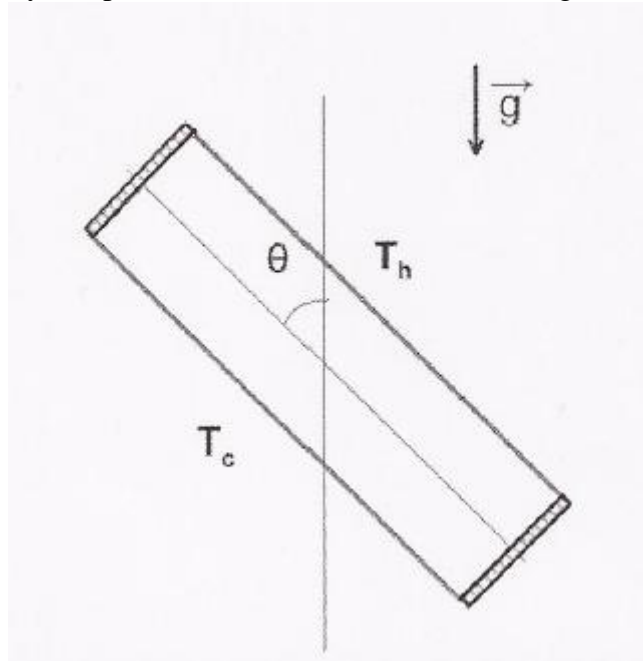
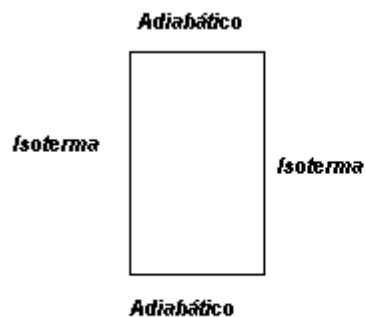


Fig.1. Columna termogravitacional con un ángulo de inclinación θ



Las ecuaciones básicas que rigen el proceso de separación son las ecuaciones locales de conservación de la masa, cantidad de movimiento y energía. Estas ecuaciones junto con la ecuación de estado y las condiciones iniciales y de contorno, determinan totalmente el problema termohidrodinámico. Nosotros aceptamos la siguiente hipótesis clásica:

- El fluido satisface la aproximación de Bousinesque
- Tenemos como ecuación de estado del fluido la relaciona lineal

$$\rho = \rho_o [1 - \alpha(T - T_m) - \beta(c - c_m)]$$

- El término de la disipación viscosa y el efecto Dufour en la ecuación de la energía son despreciables frente al resto de términos

Las ecuaciones dimensionales que gobiernan los procesos termogravitacionales son:

Ecuación de continuidad:

$$\vec{\nabla} \times \vec{v} = 0 \quad (2a)$$

Ecuación de la conservación de movimiento:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \vec{\nabla} p + \eta \vec{\nabla}^2 \vec{v} \quad (2b)$$

Ecuación de la conservación de la energía:

$$\frac{DT}{Dt} = D_{th} \nabla^2 T \quad (2c)$$

Ecuación de conservación de la masa:

$$\frac{Dc}{Dt} = D \nabla^2 c - D_T c_0 (1 - c_0) \nabla^2 T \quad (2d)$$

los parámetros sin dimensiones:

- temperatura:
 $T = (T' - T_o) / \Delta T$
 $T_o = (T_1 + T_2) / 2$
 $\Delta T = (T_1 - T_2)$
 Donde T_1 y T_2 son las temperaturas caliente y fría de las paredes respectivamente
- concentración:
 $c = (c' - c_o) / \Delta c$
 $c_o =$ concentración inicial
 $\Delta c = \delta_T * c_o * (1 - c_o) * \Delta T$
 $\delta_T =$ coeficiente de Soret

además aparecen los siguientes grupos adimensionales:

- número de Grashof:
 $G_r = (\alpha * g * \Delta T * \delta^3) / \nu^2$
- El número de Prandtl
 $P_r = \nu / D_{th}$ D_{th} : la difusividad térmica = $K / (\rho * c_p)$
- El número de Schmidt:
 $S_c = \nu / D$
- La relación de flotación o perímetro de separación ligado al efecto Soret
 $\phi = (S_T * \beta * c_o * (1 - c_o)) / \alpha$

Por último, tomaremos como ecuación de estado del fluido la relación lineal:

$$\rho = \rho_o [1 - \alpha (T - T_m) - \beta (c - c_m)]$$

$$T_m = \frac{1}{2} (T_1 + T_2)$$

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c, \rho}$$

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial c} \right)_{T, \rho}$$

Condiciones de contorno

Para $t = 0$

- Velocidad: $\vec{V} = \vec{0}$
- Temperatura: T_m
- Concentración: C_0

Para $t > 0$

- Velocidad: $x = 0, x = d \text{ e } y = 0, y = H \Rightarrow u = w = 0$
- Temperatura: $x = 0 \Rightarrow T = T_c$
 $x = d \Rightarrow T = T_h$
 $y = 0, y = H \Rightarrow \frac{\partial T}{\partial y} = 0$
- concentración: $x=0, x = d \Rightarrow D \left[\frac{\partial c}{\partial x} \right] - D_T c_0 (1 - c_0) \left[\frac{\partial T}{\partial x} \right] = 0$

$$y = 0, y = H \Rightarrow \frac{\partial c}{\partial y} = 0$$

Para obtener las ecuaciones y las condiciones de contorno adimensionales, nosotros hemos utilizado las siguientes variables adimensionales:

$$\vec{r}^* = \frac{\vec{r}}{\delta}; \quad \vec{V}^* = \frac{\vec{v}\delta}{\nu}; \quad t^* = \frac{t\nu}{\delta^2}; \quad p^* = \frac{p\delta^2}{\rho\nu^2}; \quad T^* = \frac{(T-T_m)}{\Delta T}$$

$$C^* = \frac{(c-c_0)}{\Delta c} \text{ donde } \Delta c = S_{T^*} c_{0^*}(1 - c_{0^*}) \Delta T$$

$$\frac{D^* T^*}{Dt^*} = \frac{1}{Pr} \nabla^{*2} T^* \quad (3a)$$

$$\frac{D^* c^*}{Dt^*} = \frac{1}{Sc} (\nabla^{*2} c^* - \nabla^{*2} T^*) \quad (3b)$$

$$\frac{D^* \xi^*}{Dt^*} = Gr \frac{\partial^* T^*}{\partial x^*} + \phi Gr \frac{\partial^* c^*}{\partial x^*} + \nabla^{*2} \xi^* \quad (3c)$$

$$\nabla^{*2} \psi^* = -\xi^* \quad (3d)$$

Las condiciones de contorno son:

- En $t=0$
 $u^* = w^* = 0$
 $T^* = 0$
 $c^* = 0$
- En $t \neq 0$
 $u^* = w^* = 0$

$$T^* = \begin{cases} 0 & \text{en } x^* = -1/2 \\ 1 & \text{en } x^* = 1/2 \end{cases}$$

$$\frac{\partial^* T^*}{\partial y^*} = 0 \Rightarrow y^* = 0, y^* = A$$

$$\frac{\partial^* c}{\partial x^*} - \frac{\partial^* T^*}{\partial x^*} = 0 \Rightarrow x^* = 0, x^* = 1$$

$$\frac{\partial^* c^*}{\partial y^*} = 0 \Rightarrow y^* = 0, y^* = A$$

$$\psi^* = 0$$

$$\zeta_{\text{pared}}^* = - \frac{\partial^{*2} \psi^*}{\partial n^2} \quad n: \text{normal en la pared}$$

4.3.- PROPIEDADES TERMOFÍSICAS Y PARÁMETROS DIMENSIONALES DE LA MEZCLA AGUA-ETANOL

La mezcla binaria usada es Agua-Etanol con una concentración másica del 39.12% de etanol, y una temperatura media de 25°C, en el estado estacionario. Las propiedades termofísicas de la mezcla son las siguientes:

TABLA 1. Propiedades de la mezcla de Agua(68.88%)-Etanol(39.12%) a $\bar{T} = 25^\circ\text{C}$

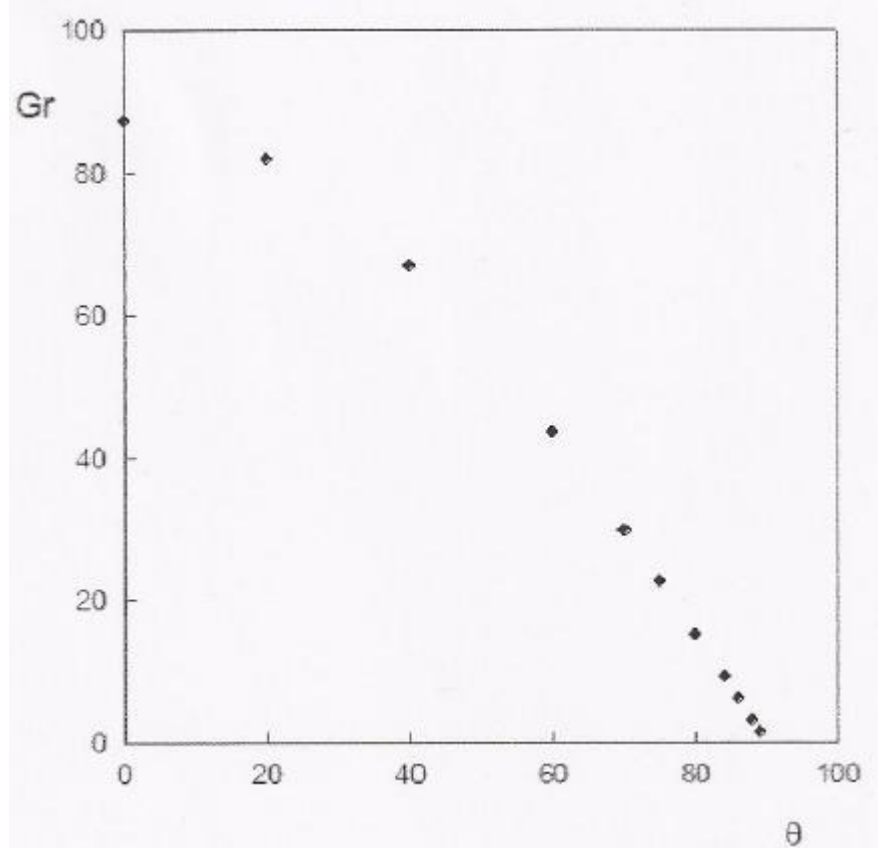
Propiedades de la mezcla	Símbolo	Unidades	Valor numérico
Fración másica de agua	c_0		0.6088
Densidad	ρ_0	Kg/m^3	933.30
Coefficiente de expansión térmica	α	K^{-1}	7.95×10^{-4}
Coefficiente de expansión másico	β		0.210
Viscosidad cinemática	ν	m^2/s	2.43×10^{-6}
Conductividad térmica	k	$\text{J}/\text{m s K}$	0.4406
Poder calorífico	c_p	J/KgK	3500.1
Coefficiente de difusión isotérmico	$D^{(1)}$	m^2/s	4.55×10^{-10}
Coefficiente termodifusión	$D_T^{(1)}$	m^2/sK	1.46×10^{-12}
Coefficiente termodifusión	$D_T^{(2)}$	m^2/sK	1.45×10^{-12}
Coefficiente Soret	$S_T^{(1)}$	K^{-1}	3.19×10^{-3}

(1) Zhang et al. [12]

(2) Nuestra muestra

Los experimentos se han realizado con una columna plano-paralela que tiene una altura de $58,5 \times 10^{-2} \text{m}$, tiene una distancia entre tomas top-bottom de $46 \times 10^{-2} \text{m}$ y un gap de $1,64 \times 10^{-3} \text{m}$. Usando los valores de la tabla 1 y de acuerdo a las medidas de nuestra columna, nosotros hemos obtenido los siguientes parámetros adimensionales:

- Una relación de aspecto de $A=356,71$
- El número de Grashof varia con el grado de inclinación de la columna



- El número de Prandtl es de 18,04
- El número de Schmidt es de 5340,7

Para discretizar las ecuaciones diferenciales adimensionales, ecuaciones 3 (a-d) y las condiciones de contorno, nosotros hemos utilizado el método de diferencias finitas utilizando los desarrollos de Taylor para las derivadas, con un esquema de segundo orden. Esta conversión se realizó utilizando el Alternating Direction Implicit (ADI) y el resultado de las ecuaciones se resolvió con el algoritmo de Thomas [5]. La ecuación de Poisson para las líneas de corriente fue resuelta utilizando el método del falso transitorio.

La malla que hemos tomado es uniforme en la dirección horizontal y hemos elegido con un número de puntos de 51. El número de puntos en la dirección vertical es de 771 al cual le hemos aplicado un fuelle de valor 0,987. De esta manera, la malla más tupida se encuentra en los extremos de la columna, que es ahí donde se producen los efectos de borde.

Por lo general, se utilizó un paso temporal de $1,2 \times 10^{-4}$ para tener en cuenta el criterio de Courant [5].

4.4.- SIMULACIÓN NUMÉRICA

Ahora vamos a mostrar los mapas de contorno de temperatura, las líneas de corriente y la concentración dependiendo del ángulo de inclinación de la columna termogravitacional.

Primero, nosotros mostramos las isothermas y las líneas de corriente:

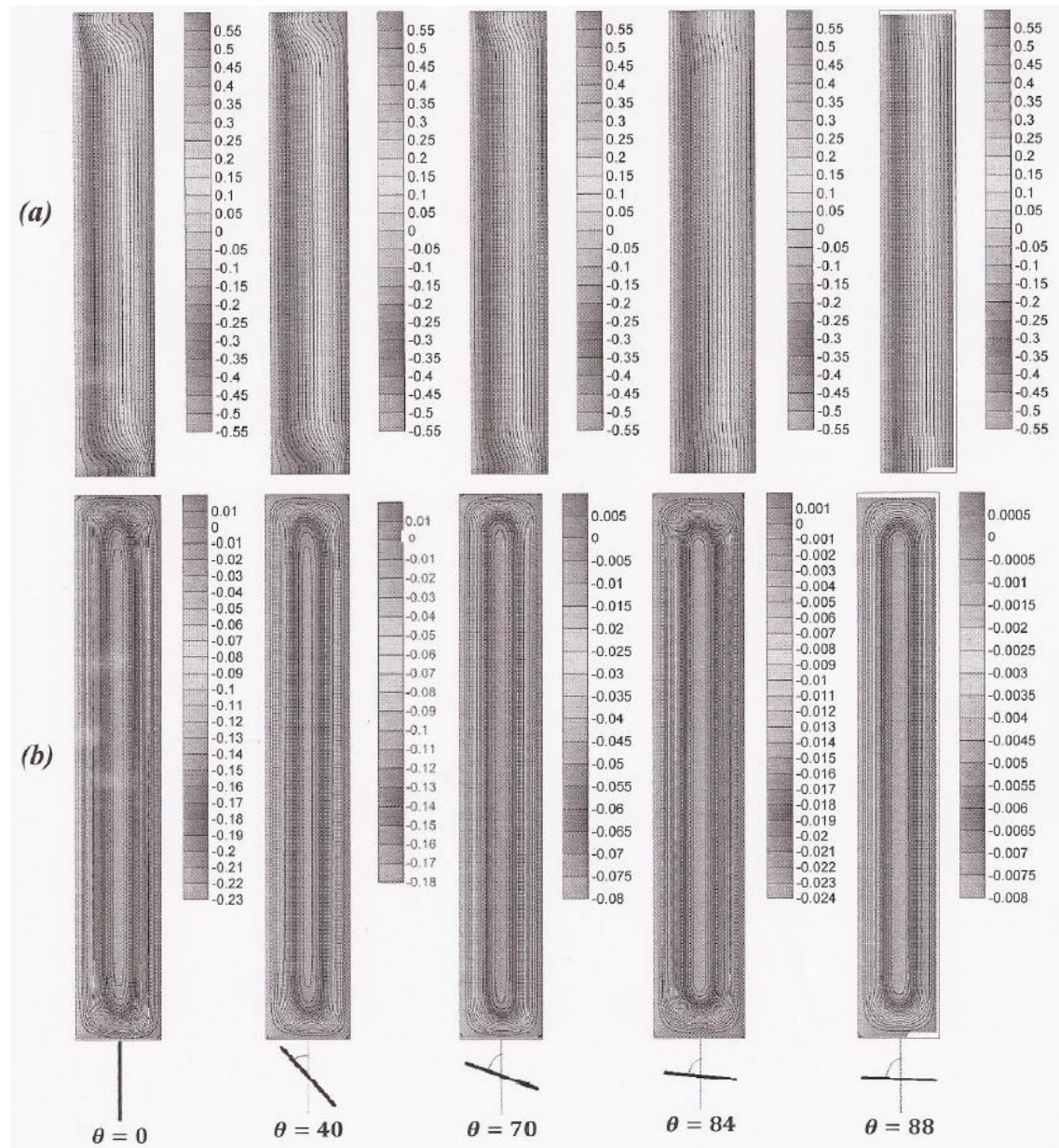


FIG.3. Líneas de contorno de temperatura (a) y líneas de corriente (b), para diferentes ángulos de inclinación de la columna.

Esto es un flujo de régimen conductivo, desde las isothermas (figura 3a) son verticales y casi paralelas a la cavidad, y el efecto de borde puede verse en los extremos. Este efecto desaparece con la inclinación de la columna y se convierten en muy pequeños para ángulos mayores que $\theta = 80^\circ$.

En todos los casos nosotros tenemos un número de Grashof bajo, $G_r = 87.387$ en $\theta = 0^\circ$ y $G_r = 3.0498$ en $\theta = 88^\circ$, por lo tanto es un régimen convectivo monocelular como se muestra en la figura 3(b).

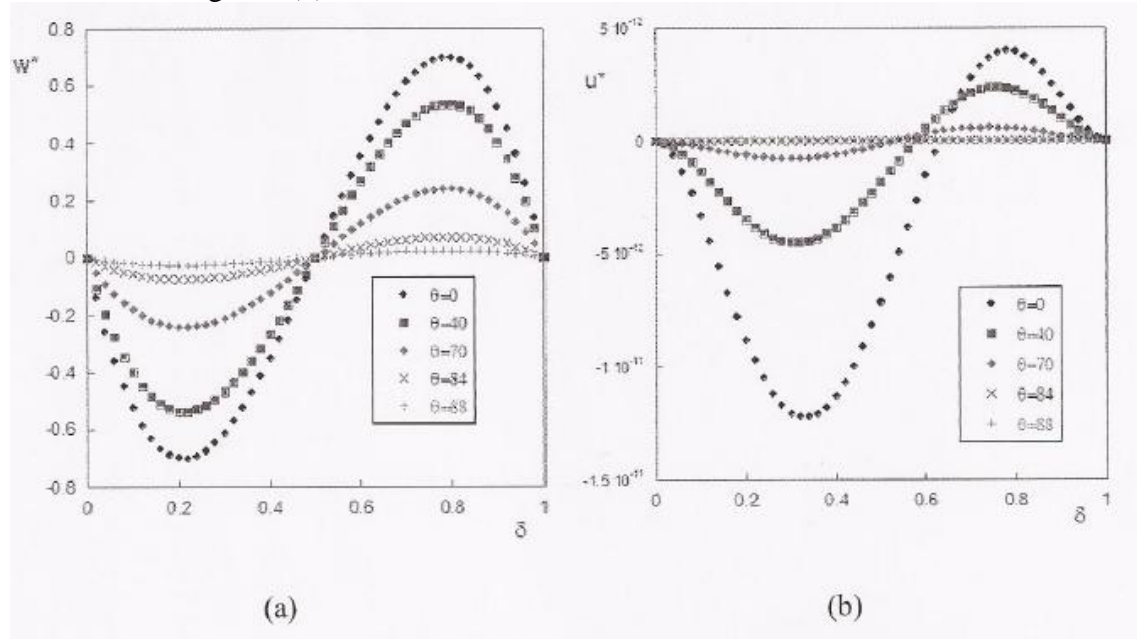


FIG.4. Componentes vertical (a) y horizontal (b) de velocidad el ángulo de inclinación de la columna termogravitacional

La componente de velocidad vertical en el medio de la columna es cubica y antisimétrica, como se muestra en las curvas para diferentes grados de inclinación de la figura 4a. El módulo de componente de la velocidad vertical decrece con el ángulo. Para un ángulo $\theta = 0^\circ$, $|w| = 1.034 \times 10^{-3} \text{ m/s}$; para un ángulo $\theta = 88^\circ$ en la máxima inclinación, $|w| = 0.036 \times 10^{-3} \text{ m/s}$. Nosotros podemos ver que decrece el modulo de la velocidad vertical para $\theta = 88^\circ$, en relación a la columna en posición vertical, en el medio es el 95.52%. La posición de valor mínimo de la componente de la velocidad vertical es $x_{\min} = 0.36 \times 10^{-3} \text{ m}$, y los valores máximos son $x_{\max} = 1.30 \times 10^{-3} \text{ m}$. En la figura 4b, nosotros podemos ver que la componente de la velocidad vertical es básicamente inexistente, y este es el caso de regímenes conductivos. Con respecto a los mapas de concentración, nosotros podemos ver las siguientes distribuciones:

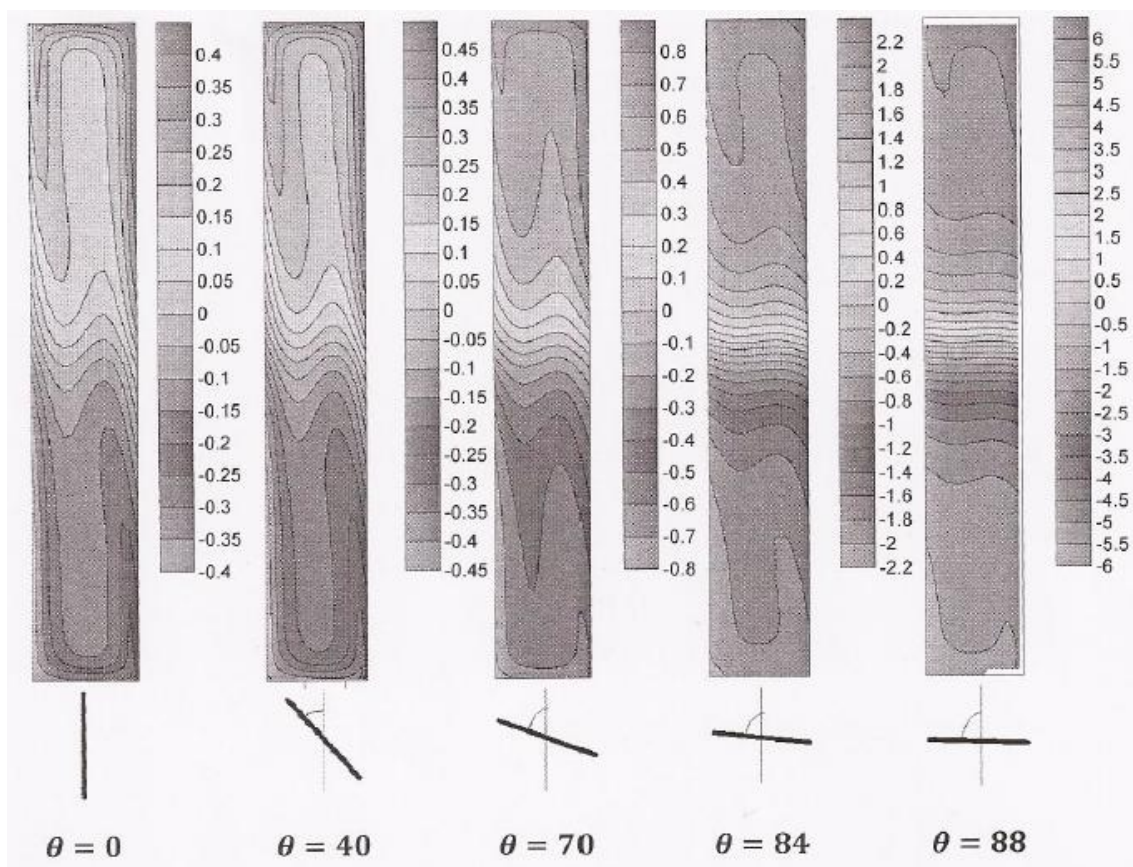


FIG.5. Líneas de contorno de concentración para diferentes ángulos de inclinación de la columna.

En la figura 5, nosotros podemos ver como el mapa de concentración es modificado bajo la influencia del ángulo de inclinación de la columna. Ya que contamos con una mezcla con un coeficiente Soret positivo, el componente más denso descende a través de la pared fría de la columna y se concentra en la base de la columna. Por otra parte el componente más ligero asciende a través de la columna caliente y se concentra en la parte alta. Esta separación es más intensa para ángulos de inclinación de la columna termogravitacional mayores.

Debajo, nosotros hemos representado el centro de la columna con los perfiles de concentración de la muestra.

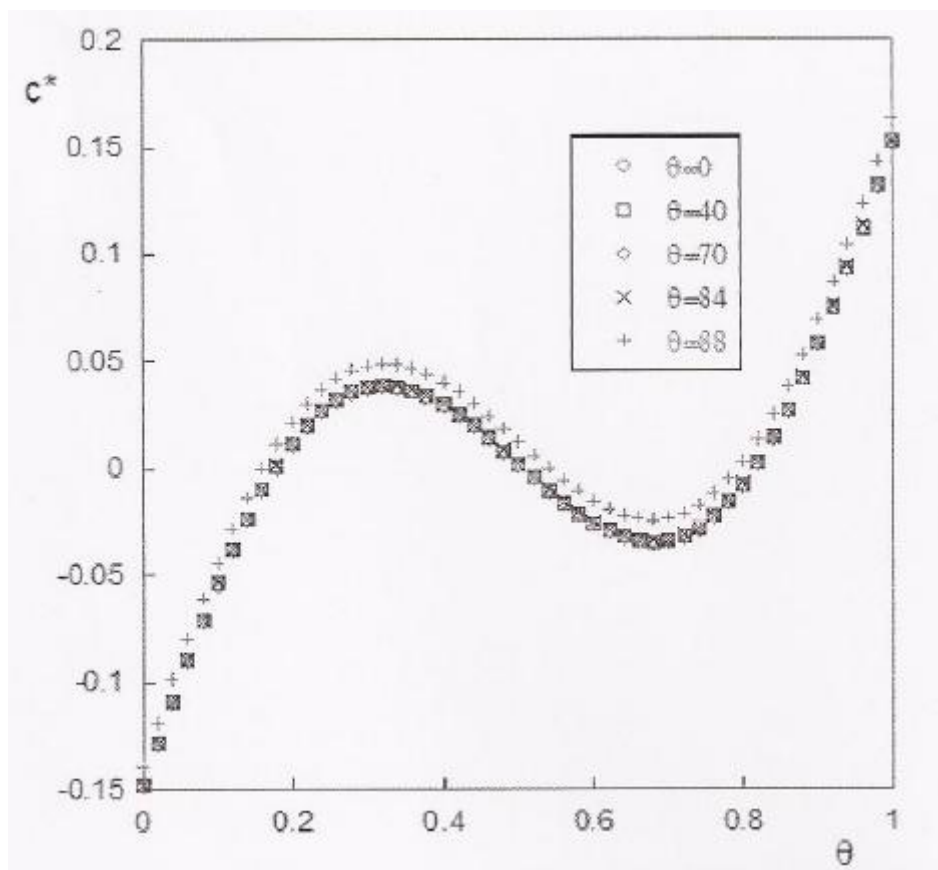


FIG.6. Concentraciones dependiendo el ángulo de inclinación de la columna.

La figura 6 muestra los perfiles de concentración con la presencia casi constante de las dos componentes en la columna. Dependiendo del ángulo de inclinación de la columna, estas reparticiones de las constituyentes varían conforme el ángulo aumenta. El valor en la posición de máximo es $x_{max}^* = 0.326$, mientras, el valor de posición mínima es $x_{min}^* = 0.683$. Los valores de concentración son:

TABLA 2. Valores de concentración para ángulos $\theta = 0^\circ$ y $\theta = 88^\circ$ de la columna

θ	c_{max}^*	c_{min}^*
0	0.0367	-0.0352
88	0.0502	-0.0246

Como podemos deducir de la tabla 5, nosotros hemos incrementado un 25.1% en la concentración para $\theta = 88^\circ$, en relación con la columna vertical, $\theta = 0^\circ$. Y para el mínimo nosotros hemos obtenido una disminución de -43.09% en la concentración para $\theta = 88^\circ$, en relación con la columna vertical, $\theta = 0^\circ$.

4.5.- MÉTODO EXPERIMENTAL

Nosotros hemos usado una mezcla de Agua-Etanol con una concentración en masa del 39.12% en etanol y la temperatura media es de 25°C. Para crear el gradiente de temperatura, nosotros hemos usado dos baños de agua de la marca LAUDA con termómetros digitales con un error del 0.01K. La temperatura aumenta aunque nosotros

hemos usado en cada caso $\Delta T = 15\text{K}$. La columna termogravitacional está colocada en un disco giratorio con el fin de medir el ángulo de inclinación. La densidad del top-bottom en el estado estacionario, así como la variación de la densidad con fracción másica de esta mezcla, ha sido medida con un hidrómetro DMA 500 por Antoon PARA, con una precisión de $2 \times 10^{-6} \text{g/cm}^3$.

Esta separación es obtenida por la siguiente expresión:

$$\Delta c_{\infty} = \frac{1}{\rho_0 \beta} \Delta \rho_{\infty}$$

Donde: ρ_0 y β son indicadas en la tabla 1.

En el momento de la recogida de la muestra, nosotros hemos tenido en cuenta el tiempo de relajación que viene definido por la siguiente expresión:

$$t_r = \frac{\varphi}{(\Delta T)^2} \left(\frac{\nu}{\alpha}\right) D \quad \text{donde: } \varphi = \left(\frac{L}{\pi \times g^*}\right)^2 \times \frac{9!}{\delta^6}$$

Esta ecuación tiene relevancia práctica para obtener el coeficiente de difusión Fikian [11]. Nosotros hemos cogido temperaturas diferentes con $\Delta T = 15^\circ\text{C}$. Debajo, nosotros mostramos la variación del tiempo de relajación dependiendo del ángulo.

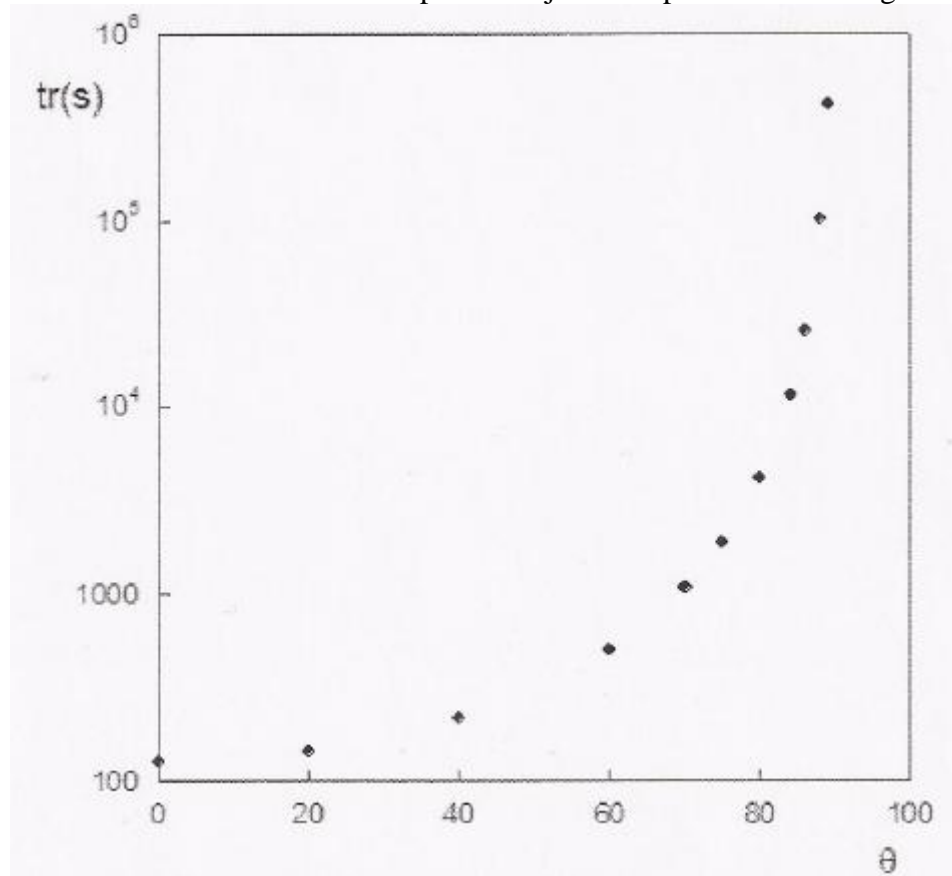


FIG. 7. Representación del tiempo de relajación dependiendo del ángulo de inclinación de la temperatura termogravitacional.

Nosotros podemos ver como el tiempo necesario para llegar al estado estacionario aumenta significativamente dependiendo de la inclinación de la columna.

4.6.- DEBATE DE RESULTADOS.

Con el fin de obtener la separación estacionaria teórica de la columna, nosotros hemos usado la siguiente expresión:

$$\Delta c_{\infty} = c_0 \times (1 - c_0) \times \psi \times \frac{D_{tv}}{\alpha}$$

Esta ecuación es usada con el fin de obtener el coeficiente de difusión térmico donde ψ es una constante geométrica de la columna y es la siguiente:

$$\psi = \frac{504 \times \Delta y}{g \times \cos \theta \times \delta^4}$$

El valor de la constante ψ para la columna usada es:

$$\psi = 3.2670 \cos^{-1} \theta \times 10^{12} \frac{s^2}{m^2}$$

Para las mediciones experimentales de la separación estacionaria (ec.4), ello es relevante para obtener el coeficiente de difusión térmica (ec.6). Nuestro coeficiente ha sido comparado con los de otros autores como Zhang et al [12], y Kolodner et al [13]. Estos autores han utilizado métodos ópticos en la célula termodifusora. Nuestro valor tiene una desviación del 0.6% comparado con Zhang [12], que se encuentra dentro de los error experimental.

Como se muestra en la ec.6 y ec.7, la separación estacionaria depende del ángulo de inclinación. El valor de la simulación numérica es obtenido por extracción de concentración de la parte superior y concentración de la parte inferior, así calculamos Δc_{∞} (numéricamente), ec.4.

TABLA 3. Variación de la separación teórica y numérica dependiendo del ángulo

θ	Δc_{∞} (teórica)	Δc_{∞} (Numérica)	DIFERENCIA (%)
0	0.0034485	0.0034488	0.0086961
20	0.0036698	0.0036797	0.2697700
40	0.0045016	0.0045138	0.2710200
50	0.0053648	0.0053786	0.2572400
60	0.0068969	0.0069158	0.2740300
70	0.0100830	0.0101130	0.2975300
75	0.0133240	0.0134420	0.8856200
80	0.0198590	0.0199930	0.6747600
84	0.0329910	0.0331250	0.4061700
86	0.0494360	0.0495900	0.3115100
88	0.0988110	0.0984030	0.4127100

En la tabla 3 nosotros podemos ver que hay un acuerdo entre ambos valores para diferentes ángulos de inclinación de la columna, La desviación en todos los casos es inferior al 0.9%.

Debajo, nosotros mostramos los valores de la simulación numérica y aquellos obtenidos experimentalmente.

TABLA 4. Variación de la separación numérica y experimental dependiendo del ángulo.

θ	Δc_{∞} (Numérico)	Δc_{∞} (Experimental)	DIFERENCIA (%)
0	0.0034488	0.0034663	0.51587
20	0.0036797	0.0035172	4.15850
40	0.0045138	0.0043723	2.87210
50	0.0053786	0.0054158	0.94990
60	0.0069158	0.0066068	4.20590
70	0.0101130	0.0097846	2.95940
75	0.0134420	0.0126180	5.29790
80	0.0199930	0.0197340	0.62943
84	0.0331250	0.0319320	3.21000
86	0.0495900	0.0482580	2.38290
88	0.0984030	0.0971470	1.68400

En la tabla 4, los valores son constantes entre la simulación numérica y los valores obtenidos experimentalmente. Los errores son menores al 5%, y por lo tanto se encuentra dentro del error experimental.

Debajo, nosotros incluido la separación de la mezcla dependiendo del ángulo de inclinación de la columna:

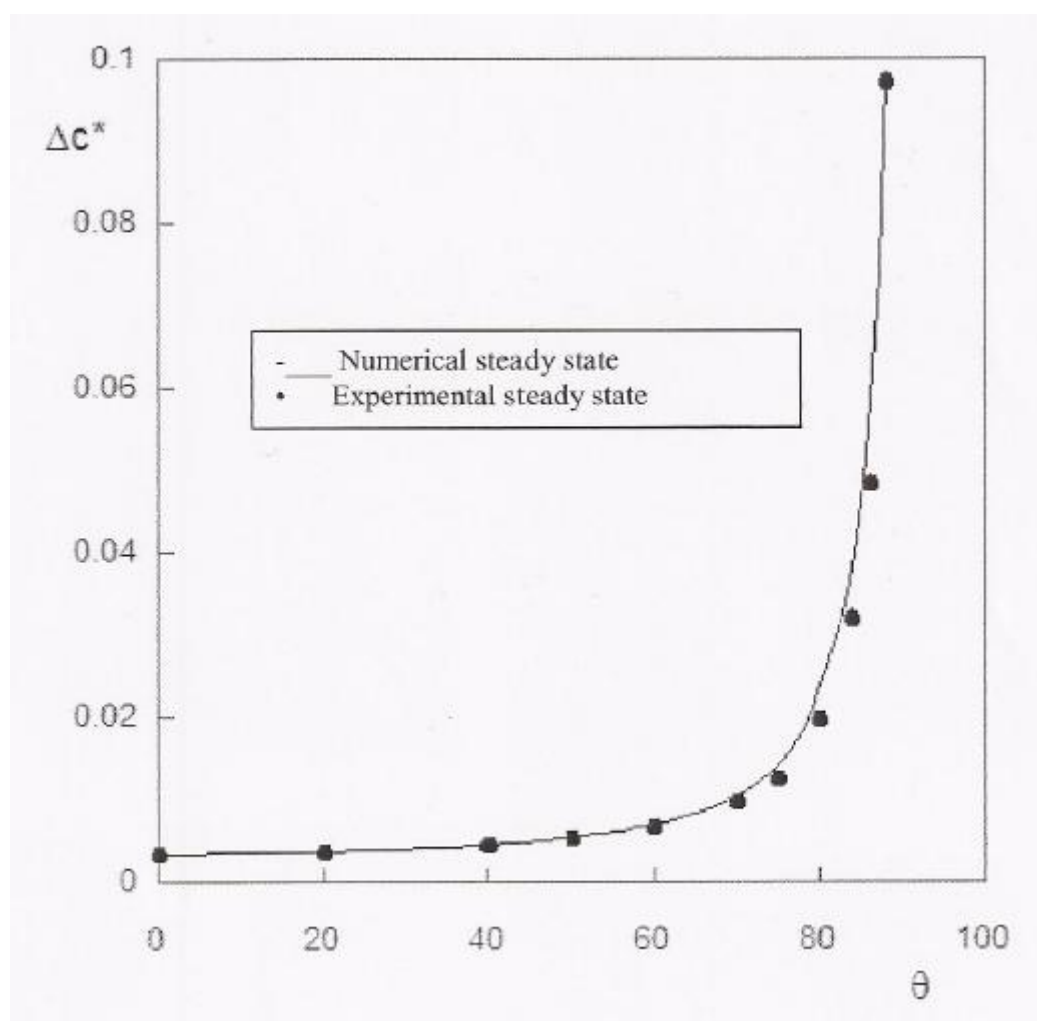


FIG. 8. Separación Agua-Etanol dependiendo del ángulo de inclinación de la columna termogravitacional.

En la figura 8, nosotros mostramos como aumenta significativamente la separación de acuerdo al ángulo de inclinación de la columna termogravitacional.

Nosotros también podemos comparar el tiempo de relajación (ec.5) y la separación experimental (ec.4) de la muestra para diferentes ángulos en comparación con los valores que hemos obtenido para la columna vertical.

TABLA 5.

θ	Tiempo relajación (s) (%)	Separación (%)
0	0.00	0.00
20	11.70	1.45
40	41.32	20.72
50	58.68	36.00
60	75.00	47.53
70	88.30	64.57
75	93.30	72.53
80	96.99	82.43
84	98.91	89.14
86	99.51	92.82
88	99.88	93.43

En la tabla 5 nosotros podemos ver como la separación de los componentes de la mezcla puede ser superior al 90% comparado con la columna vertical. Por otra parte, el tiempo necesario para llegar al estado estacionario incrementa significativamente. Por lo tanto nosotros debemos encontrar un compromiso entre la separación y el tiempo necesario para llegar al estado estacionario.

4.7.- CONCLUSIONES

Las ecuaciones termo-hidrodinámicas que gobiernan el fenómeno de la termodifusión para mezclas binarias en la columna termogravitacional son resueltas numéricamente en 2D. Nosotros estamos interesados en analizar, utilizar la simulación numérica, la influencia en la inclinación para la columna termogravitacional en la separación de la mezcla para una mezcla binaria. Nosotros variamos el ángulo, desde un valor inicial, $\theta = 0^\circ$, cuando la columna esta vertical, hasta el valor extremo, $\theta = 88^\circ$.

Los resultados obtenidos por la simulación numérica son comparados con los resultados teóricos, y están de acuerdo ya que el error cometido es inferior al 0.9%. Además también lo hemos comparado con los valores experimentales y nosotros hemos encontrado errores inferiores al 5%. Tablas 3,4.

Para el estudio de la simulación numérica nosotros hemos podido obtener el mapa de isotermas, líneas de corriente y líneas de concentración, nosotros podemos ver su forma y distribución dentro de la columna termogravitacional. Nosotros podemos ver que es un régimen monocelular. El mapa de concentración muestra como aumenta la separación cuando aumentamos la inclinación de la columna. En términos cuantitativos, la tabla 5 muestra como aumenta la separación de los componentes de la mezcla cuando la columna esta inclinada, comparando con la columna vertical, y ello puede ser mayor del 90% para $\theta = 88^\circ$.

Los perfiles de velocidad vertical son estudiados en el medio de la columna, y ello muestra como decrece la componente vertical de velocidad cuando la columna esta

inclinada. Para $\theta = 88^\circ$, hay un incremento del 96.52%, en la velocidad vertical comparado con la columna en vertical. Nosotros también analizamos los perfiles de concentración en el medio de la columna, en tabla 2, muestra un aumento del 25.1% en concentración para $\theta = 88^\circ$, comparando con la columna vertical, $\theta = 0^\circ$. Y para el mínimo nosotros hemos obtenido una disminución del -43.09%, comparando con la columna en posición vertical, $\theta = 0^\circ$.

Entre los extremos de la columna, para el estudio de la simulación numérica y experimental, nosotros encontramos que la separación de las sustancias para la mezcla binaria aumenta si nosotros aumentamos el ángulo. Se puede ver en la tabla 5, este incremento puede ser mayor al 90% en $\theta = 88^\circ$, comparado con la columna en posición vertical. Además, el tiempo de relajación necesario para llegar al estado estacionario aumenta en la misma proporción. Además, esto es recomendable para encontrar un valor óptimo entre ambos parámetros para hacer un proceso operacional. El caso donde es interesante inclinar la columna son aquellas mezclas con tiempos de relajación pequeños, o mezclas donde la separación no se puede medir con precisión para el efecto Soret

5.- Coeficiente de expansión térmica (α) y coeficiente másico (β) de las sustancias binarias.

Para la realización de todo el proyecto hemos tenido que medir tanto las viscosidades como las densidades de las composiciones binarias que hemos utilizado, además también hemos medido tanto la viscosidad como la densidad de la mezcla binaria, agua-metanol, con ello hemos conseguido tanto la constante α (coeficiente de difusión térmica), como β (coeficiente de difusión másica).

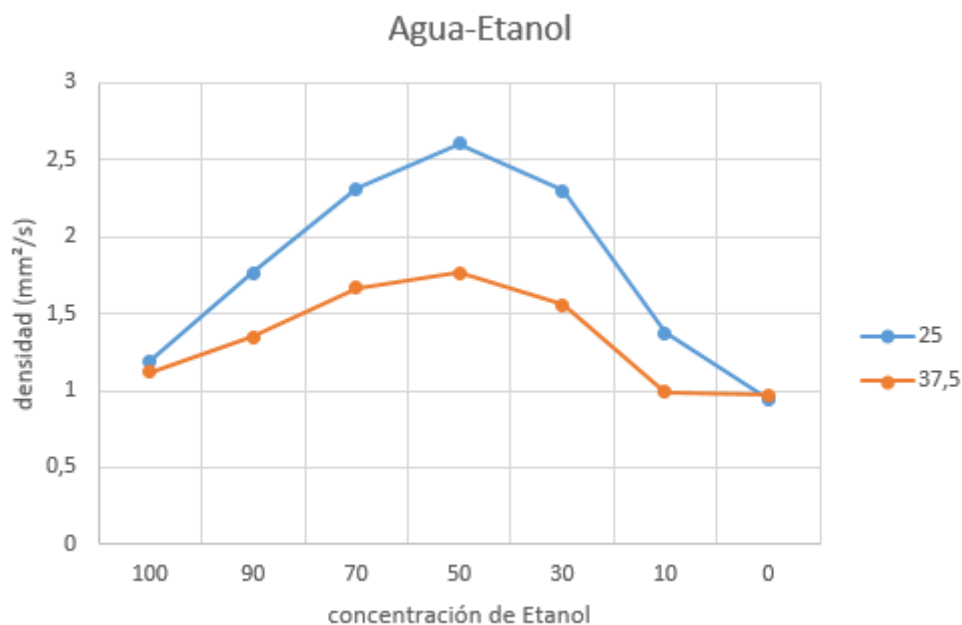
Para la medición de dichas composiciones binarias, lo primero que hemos realizado es asegurarnos de que los dispositivos que hemos empleado funcionaban correctamente mediante la composición binaria de Tolueno-Hexano. Las densidades como las viscosidades nos salían igual que las teóricas, por lo que corroboramos que estaba correctamente.

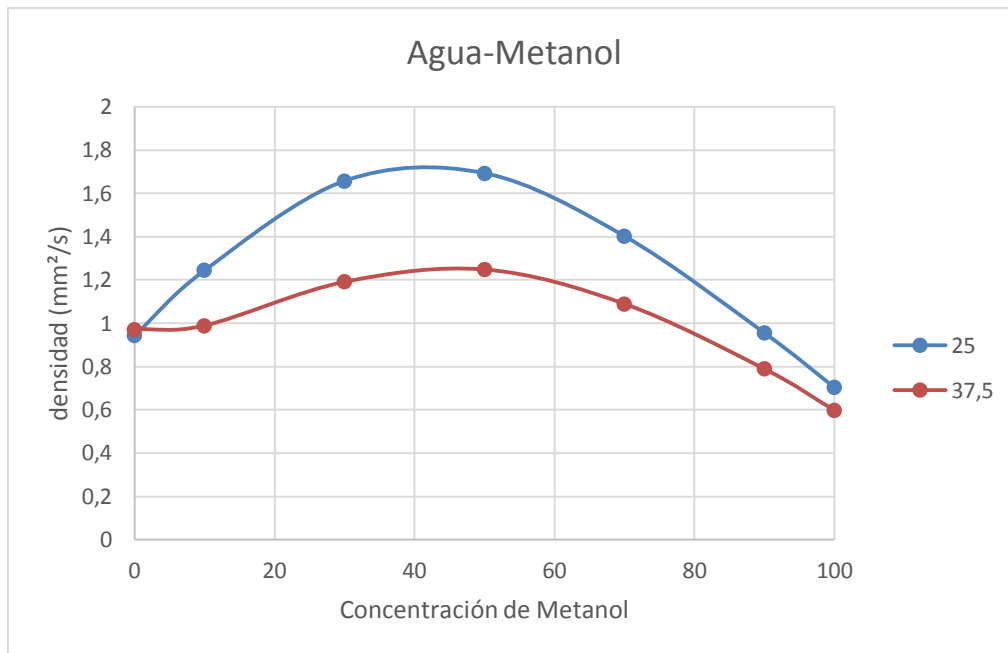
Calculábamos la cantidad de masa apropiada a los porcentajes que queríamos medir, en cada caso con su correspondiente porcentaje de cada sustancia y lo pesábamos mediante un peso, Lauda, una vez pesado parte de la mezcla la utilizábamos en el viscosímetro de marca Lauda para la obtención del dato de la viscosidad y la otra parte de la misma la llevamos al densímetro para calcular la densidad, lo realizábamos mediante un densímetro ANTON con una precisión de 10^{-6} .

Tras haber obtenido todas las viscosidades de todos los porcentajes de mezclas obteníamos las siguientes tablas:

MEZCLA ETANOL-AGUA		MEZCLA METANOL-AGUA	
100% Etanol- 0% Agua		100% Metanol- 0% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 1,1932 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,12126 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,70295 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,59715 \text{ mm}^2/\text{s}$
90% Etanol- 10% Agua		90% Metanol- 10% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 1,76227 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,35164 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,95479 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,78871 \text{ mm}^2/\text{s}$
70% Etanol- 30% Agua		70% Metanol- 30% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 2,31294 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,66497 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,40242 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,08952 \text{ mm}^2/\text{s}$
50% Etanol- 50% Agua		50% Metanol- 50% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 2,60426 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,76532 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,69323 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,24831 \text{ mm}^2/\text{s}$
30% Etanol- 70% Agua		30% Metanol- 70% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 2,30142 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,55319 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,65784 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,19129 \text{ mm}^2/\text{s}$
10% Etanol- 90% Agua		10% Metanol- 90% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 1,374 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,98961 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 1,24432 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,98944 \text{ mm}^2/\text{s}$
0% Etanol- 100% Agua		0% Metanol- 100% Agua	
t= 25°C	t= 37,5°C	t= 25°C	t= 37,5°C
$\nu = 0,94307 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,97187 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,94307 \text{ mm}^2/\text{s}$	$\nu = 0,97187 \text{ mm}^2/\text{s}$

Con los datos anteriormente sacados del viscosímetros hemos realizado dos tablas en la que se muestran los datos tanto de la mezcla binaria Agua-Etanol como la del Agua-Metanol





Estas gráficas nos parecían muy complejas ya que nosotros creíamos que eran lineales. Como se puede ver en las gráficas cuanto mayor es la temperatura la viscosidad es menor, ya que el fluido opone menos resistencia a desplazarse. La viscosidad iba subiendo con forme aumentábamos tanto la concentración de etanol como de metanol hasta que llegaba a un máximo, y luego iba decayendo hasta que llegaba a la viscosidad del 100% de la sustancia que estábamos midiendo. Así que investigamos y encontramos la siguiente información acerca de la composición química de los alcoholes en contacto con una solución acuosa. En la disociación de la molécula del hidrógeno entre el agua y el alcohol se produce un fenómeno muy complejo en el que la viscosidad no tiende hacia el componente sino que hace una especie de campana en la que tiene un máximo. Para poder sacar la gráfica perfecta de la viscosidad de la mezcla binaria había que aproximarla mediante la siguiente formula:

$$\sum_{i=0}^n a_i \times N^i$$

Nosotros hemos buscado datos a cerca de ello y nos hemos encontrado con esta gráfica, en la que también introducen unos términos independientes que se mostraran en la tabla 6, con estos términos independientes lo que se hace es corregir la curva y que no tenga ningún pico.

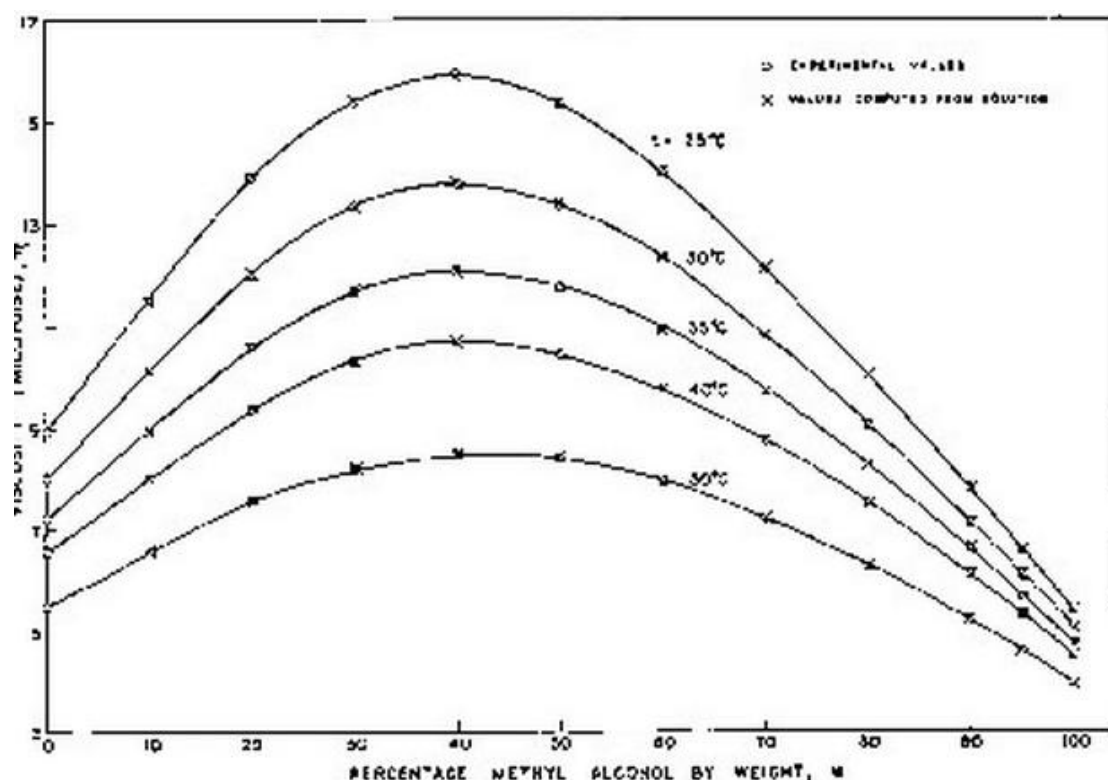


Tabla 6:

Table IV. Computed Constants for Different Weight Percentages of Methanol

Wt. % Methanol	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	Max. % Error	Mean % Error
Equation 7: Density, d , in G./ml., vs. Temperature, t , °C.							
0	1.1648	-1.9364×10^{-2}	8.2679×10^{-4}	-1.5558×10^{-5}	1.0631×10^{-7}	-0.05	0.02
10	1.1117	-1.4933×10^{-2}	6.9450×10^{-4}	-1.1955×10^{-5}	8.2093×10^{-8}	-0.01	0.01
20	8.8852×10^{-1}	9.7898×10^{-3}	-4.3998×10^{-4}	8.2770×10^{-6}	-6.7665×10^{-8}	+0.01	0.01
30	8.5160×10^{-1}	1.2585×10^{-2}	-5.6622×10^{-4}	1.0555×10^{-5}	-7.2290×10^{-8}	+0.02	0.01
40	9.6817×10^{-1}	-3.4995×10^{-2}	1.3800×10^{-4}	-2.7738×10^{-6}	1.9733×10^{-8}	0.00	0.00
50	9.6206×10^{-1}	-4.5013×10^{-2}	1.6846×10^{-4}	-3.2283×10^{-6}	2.2389×10^{-8}	0.00	0.00
60	9.9612×10^{-1}	-1.0699×10^{-2}	4.1849×10^{-4}	-7.6195×10^{-6}	5.0549×10^{-8}	0.00	0.00
70	9.3393×10^{-1}	-6.1523×10^{-2}	2.2865×10^{-4}	-4.2553×10^{-6}	2.8876×10^{-8}	-0.01	0.00
80	8.9909×10^{-1}	-4.7077×10^{-2}	1.6801×10^{-4}	-2.8846×10^{-6}	1.9575×10^{-8}	-0.02	0.01
90	9.9865×10^{-1}	-1.9995×10^{-2}	8.9439×10^{-4}	-1.5900×10^{-5}	1.1127×10^{-7}	-0.07	0.03
100	8.6237×10^{-1}	-7.1042×10^{-2}	2.6727×10^{-4}	-5.0440×10^{-6}	3.4857×10^{-8}	-0.01	0.00
Equation 10: Viscosity, η , in Milipoises, vs. Temperature, t , °C.							
0	25.503	-1.4464	4.8228×10^{-2}	-8.0351×10^{-4}	5.1496×10^{-7}	+0.25	0.14
10	29.890	-1.4226	4.1265×10^{-2}	-6.5175×10^{-4}	4.1793×10^{-7}	-0.30	0.15
20	19.832	3.0041×10^{-1}	-4.1435×10^{-2}	9.8528×10^{-4}	-7.4939×10^{-7}	+0.31	0.16
30	24.914	-5.5901×10^{-2}	-2.7324×10^{-2}	7.1069×10^{-4}	-5.5129×10^{-7}	+0.19	0.09
40	27.395	-1.8143×10^{-1}	-2.5714×10^{-2}	7.3737×10^{-4}	-6.0257×10^{-7}	-0.19	0.09
50	23.126	1.0769×10^{-1}	-3.3298×10^{-2}	8.1673×10^{-4}	-6.2318×10^{-7}	+0.25	0.12
60	30.371	-1.1161	2.6533×10^{-2}	-3.8134×10^{-4}	2.3563×10^{-7}	-0.13	0.06
70	16.780	1.0788×10^{-1}	-2.2039×10^{-2}	5.0683×10^{-4}	-3.7180×10^{-7}	+0.18	0.09
80	41.483	1.1447	-6.1256×10^{-2}	1.2072×10^{-3}	-8.4552×10^{-8}	+0.54	0.27
90	65.288	1.8792	-8.9690×10^{-2}	1.7346×10^{-3}	-1.2170×10^{-6}	-0.54	0.50
100	16.429	-1.0987	4.1657×10^{-2}	-7.3310×10^{-4}	4.7908×10^{-8}	-0.57	0.28

Como hemos comentado anteriormente la otra parte de la muestra se utilizaba para sacar el coeficiente α y β de la mezcla binaria. Lo hacíamos mediante la medición de la densidad. Así que a continuación mostraremos los datos referentes a ello.

AGUA - METANOL (t= 25°C)		AGUA - METANOL (t= 37,5°C)	
10% Metanol- 90% Agua		10% Metanol- 90% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,980381	35,5	0,976689
24	0,9801	36,5	0,976302
25	0,979801	37,5	0,975902
26	0,979493	38,5	0,975417
27	0,979177	39,5	0,975043
30% Metanol- 70% Agua		30% Metanol- 70% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,949652	35,5	0,942788
24	0,949132	36,5	0,942201
25	0,948607	37,5	0,941609
26	0,948076	38,5	0,941013
27	0,947545	39,5	0,940417
50% Metanol- 50% Agua		50% Metanol- 50% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,913067	35,5	0,904152
24	0,912374	36,5	0,903403
25	0,911668	37,5	0,902651
26	0,910963	38,5	0,901896
27	0,91025	39,5	0,901136
70% Metanol- 30% Agua		70% Metanol- 30% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,868825	35,5	0,858528
24	0,868017	36,5	0,857687
25	0,867204	37,5	0,856844
26	0,86639	38,5	0,855997
27	0,865578	39,5	0,855154
90% Metanol- 10% Agua		90% Metanol- 10% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,81685	35,5	0,805884
24	0,816251	36,5	0,804985
25	0,815355	37,5	0,804075
26	0,814464	38,5	0,803164
27	0,81357	39,5	0,802252

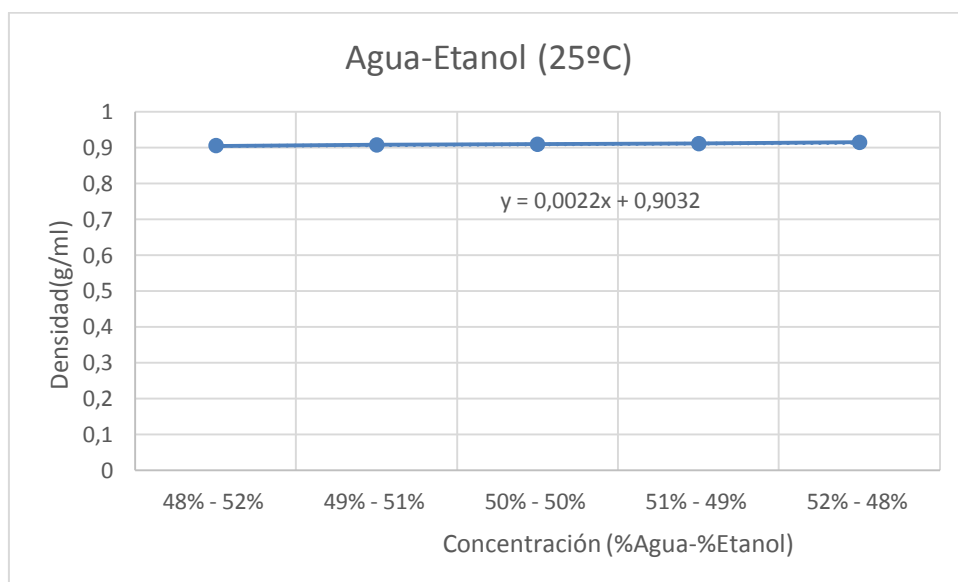
AGUA - ETANOL (t= 25°C)		AGUA - ETANOL (t= 37,5°C)	
10% Etanol- 90% Agua		10% Etanol- 90% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,980924	35,5	0,976567
24	0,980625	36,5	0,976145
25	0,980315	37,5	0,975713
26	0,979996	38,5	0,97527
27	0,979668	39,5	0,974842
30% Etanol- 70% Agua		30% Etanol- 70% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,951964	35,5	0,943722
24	0,951327	36,5	0,943032
25	0,950686	37,5	0,942337
26	0,950042	38,5	0,941639
27	0,949399	39,5	0,940944
50% Etanol- 50% Agua		50% Etanol- 50% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,911308	35,5	0,901483
24	0,910516	36,5	0,900648
25	0,909711	37,5	0,899812
26	0,908904	38,5	0,89897
27	0,908092	39,5	0,898129
70% Etanol- 30% Agua		70% Etanol- 30% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,865203	35,5	0,854298
24	0,864357	36,5	0,853411
25	0,863498	37,5	0,852523
26	0,862636	38,5	0,851633
27	0,861773	39,5	0,85074
90% Etanol- 10% Agua		90% Etanol- 10% Agua	
t	ρ	t	ρ
23	0,815528	35,5	0,804423
24	0,814655	36,5	0,803527
25	0,813778	37,5	0,802626
26	0,812902	38,5	0,801724
27	0,812031	39,5	0,800825

Aquí mostramos la densidad de la mezcla binaria tanto para el agua-metanol como para el agua-etanol, sacamos la densidad para valores de temperatura de 23, 24, 25, 26 y 27°C como de 35,5; 36,5; 37,5; 38,5 y 39,5°C, con ello lo que calcularemos es el coeficiente tanto de difusión térmica como el coeficiente de difusión másico.

La siguiente tabla lo que muestra es para una modificación muy pequeña del porcentaje de concentración a una temperatura constante de 25°C lo que se modifica la densidad

AGUA - ETANOL (t= 25°C)	
c	ρ
48% Agua- 52% Etanol	0,905248
49% Agua- 51% Etanol	0,907994
50% Agua- 50% Etanol	0,909711
51% Agua- 49% Etanol	0,911575
52% Agua- 48% Etanol	0,914478

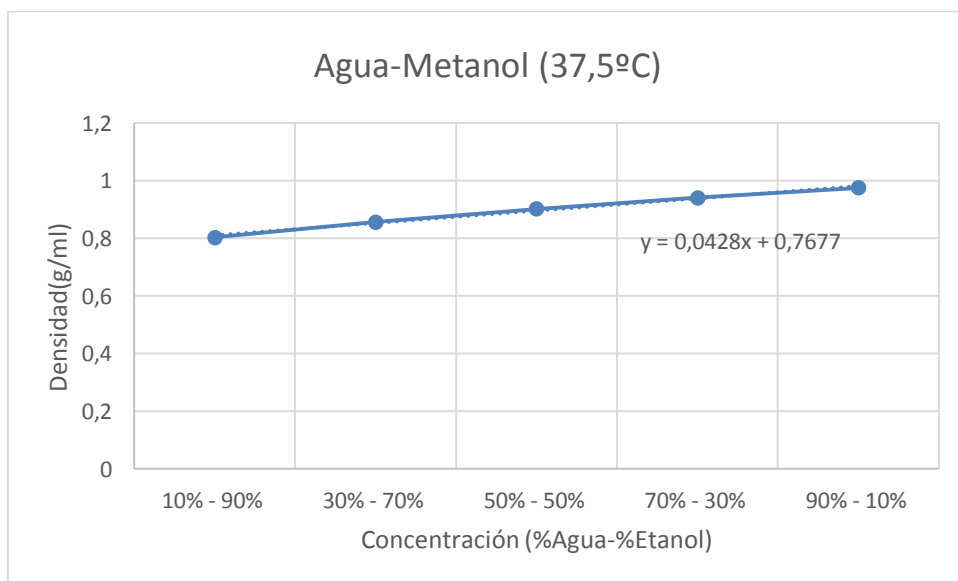
Para poder calcular el coeficiente β lo que tenemos que observar es la pendiente de la mezcla que se obtiene con todos los datos muestrales sacados anteriormente. Esta recta tiene que dar pendiente una recta, para que este correctamente. A nosotros en la muestra de agua-etanol para una temperatura de 25°C y variando la concentración de 47.5 a 52.5% de las sustancias utilizadas, nos ha dado una pendiente de 0.0022, así que hemos obtenido un error con respecto al dato teórico de 0.22%



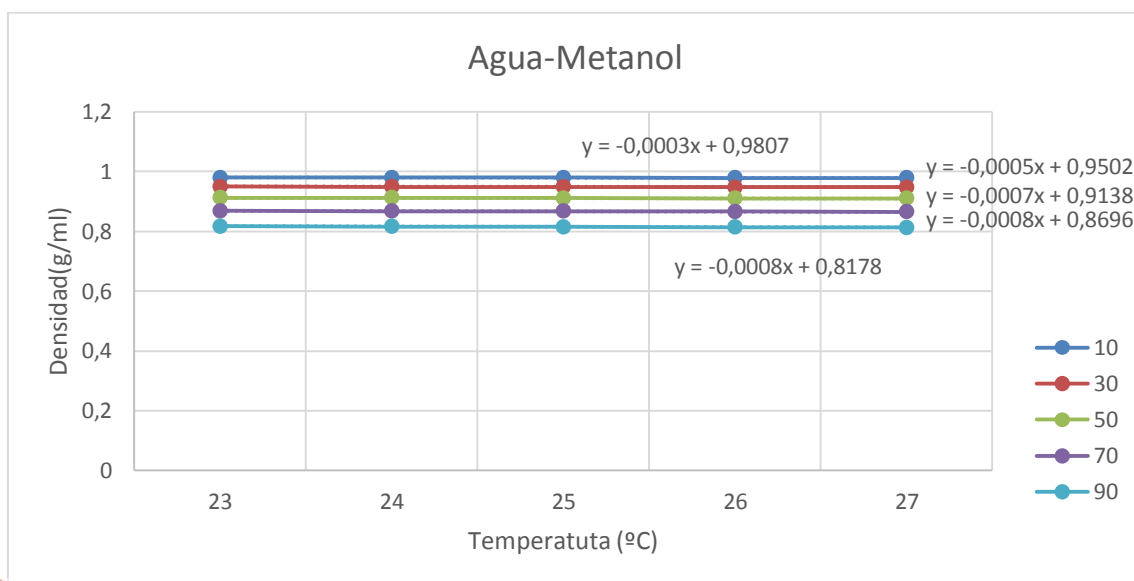
Lo mismo hemos realizado con la muestra de agua-metanol, pero sin embargo esta vez lo hemos realizado en todas sus posibles concentraciones entre el 10 y el 90% y a una temperatura constante de 37.5°C.

AGUA - METANOL (t= 37,5°C)	
c	ρ
10% Agua- 90% Metanol	0,804076
30% Agua- 70% Metanol	0,856844
50% Agua- 50% Metanol	0,902651
70% Agua- 30% Metanol	0,941609
90% Agua- 10% Metanol	0,975902

Esta vez la temperatura en vez de ser 25°C ha sido 37,5°C, como hemos dicho anteriormente la línea que nos debe de salir tiene que ser una recta. Como se ve en la siguiente recta de la gráfica nuestra pendiente es de 0,0428, así que nos desviamos de los datos teóricos un 4,28%.



A continuación calcularemos el coeficiente de difusión térmica para la mezcla binaria agua-metanol. Sacaremos las pendientes de las gráficas que ilustramos en cada una de las temperaturas de las mismas.



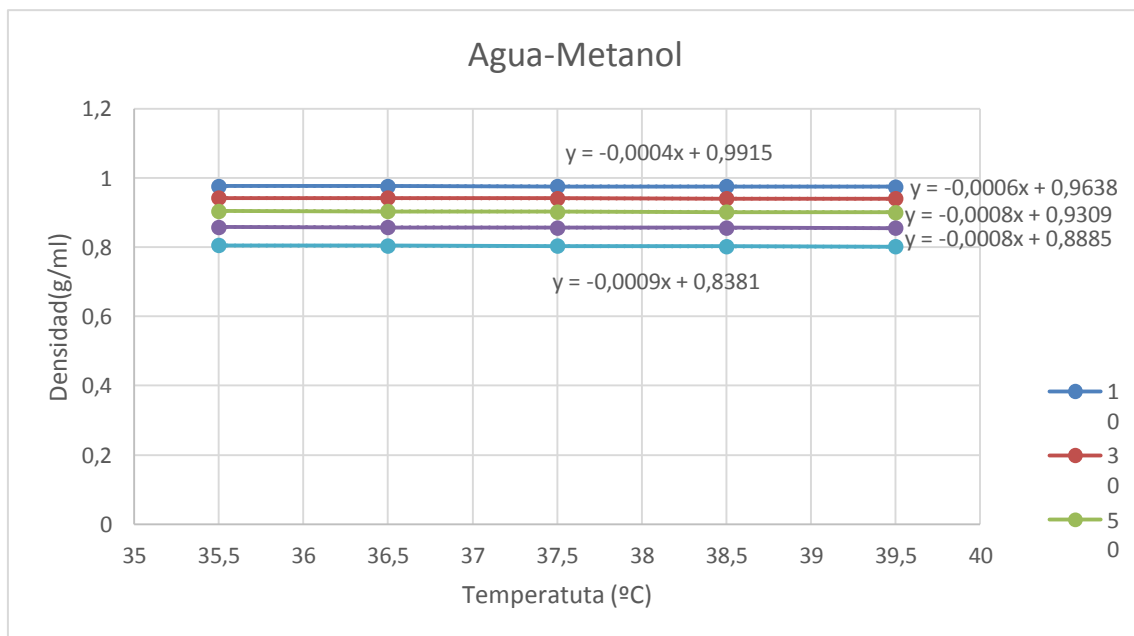
La densidad que ponemos en el denominador es la densidad media de las 5 muestras que tomamos para las diferentes temperaturas:

- Para una concentración de 10% metanol-90% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0003)}{0,979801} = 3.06 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

- Para una concentración de 30% metanol-70% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0005)}{0,948607} = 5.27 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

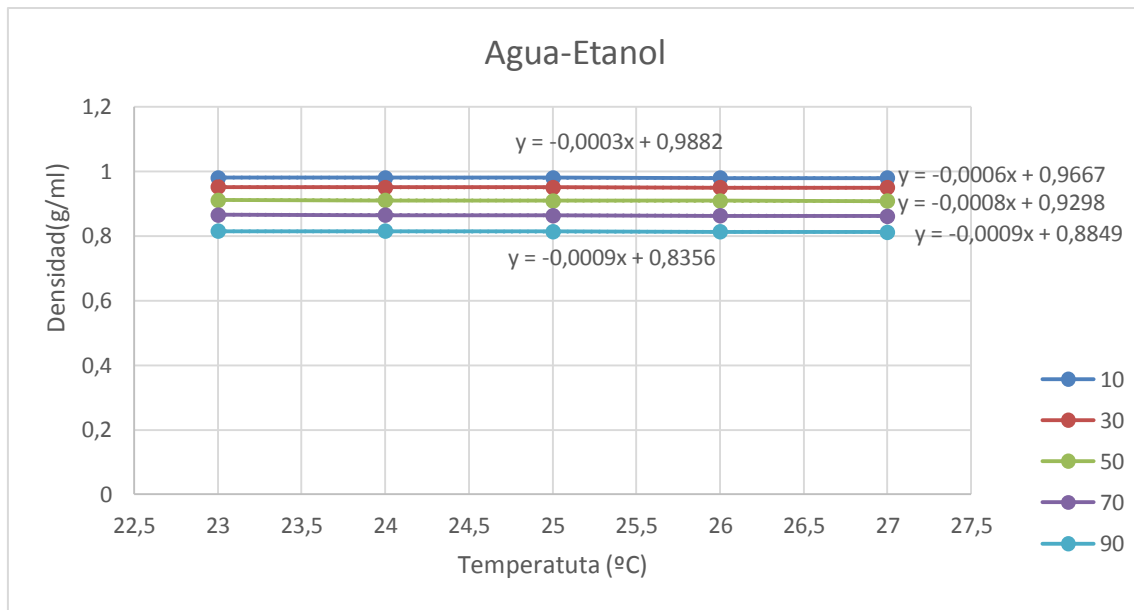


Hemos calculado solo esas dos α porque son los más interesantes que nos parecen, aunque se podrían haber calculado los 10.

Por último calcularemos el coeficiente de difusión térmica para la mezcla binaria de agua-etanol que es con la que hemos realizado todos los datos experimentales en ña columna.

Como en el caso anterior podríamos sacar 10 alfas pero no nos parece demasiado útil sacar todos ya que solo sacaremos los que nos sirvan para algo o para corroborar que están bien medidos.

A continuación mostramos la mezcla agua-etanol con sus 5 temperaturas comprendidas entre 23 a 27°C con toda su gama de concentraciones.



- Para una concentración de 30% etanol-70% agua

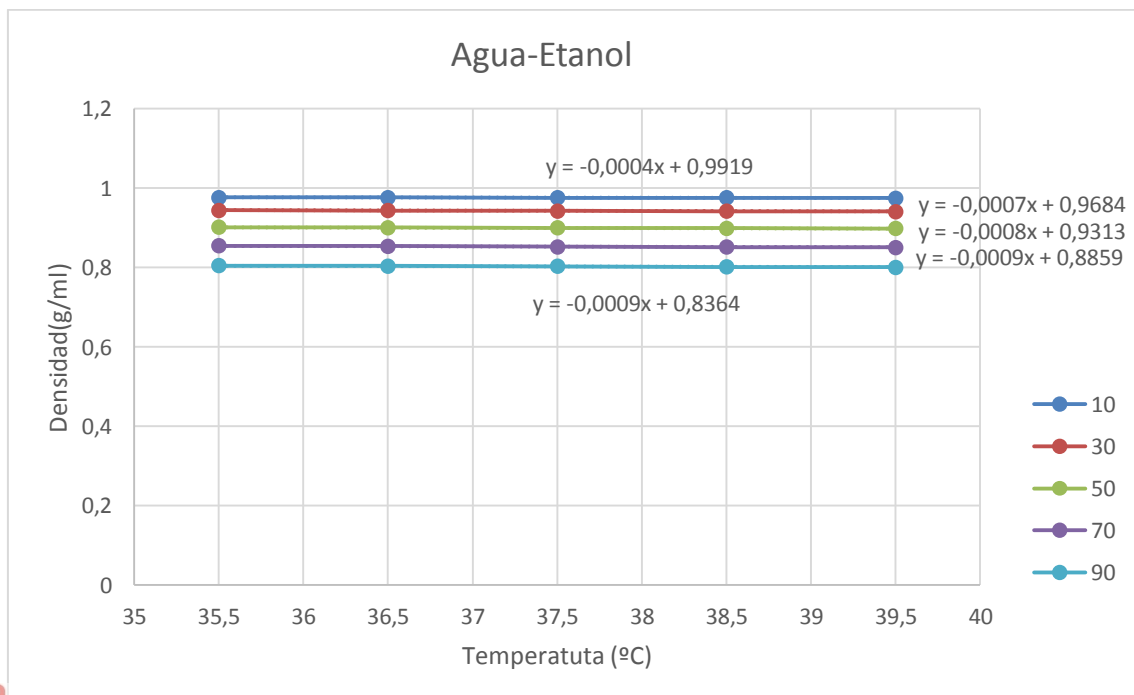
$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0006)}{0,950686} = 6.3 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

- Para una concentración de 70% etanol-30% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0009)}{0,863498} = 1.04 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$$

Con esto lo que se observa es que al aumentar la concentración de metanol en la mezcla binaria aumenta el coeficiente de difusión térmica

Mostramos a continuación la mezcla agua-etanol con sus 5 temperaturas comprendidas entre 35,5 a 37,5°C con toda su gama de concentraciones.



- Para una concentración de 30% etanol-70% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0007)}{0,942337} = 7.4 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

- Para una concentración de 50% etanol-50% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0008)}{0,899812} = 8.89 \times 10^{-4} \text{ K}^{-1}$$

- Para una concentración de 70% etanol-30% agua

$$\alpha = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{c,\rho} = \frac{-(-0.0009)}{0,852523} = 1.05 \times 10^{-3} \text{ K}^{-1}$$

Con esto lo que observamos que al aumentar la concentración del etanol aumentamos el coeficiente de difusión térmico

6.- BIOGRAFÍA

- K.Clusius y G.Dickel, "New process for separation of gas mixtures and isotopes". Naturwissenschaften, 26, 546. (1938)
- K.Clusius y G.Dickel, "Das Trennrohr.I.Grundlagen eines neuen Verfahrens zur Gasentmischung und Isotropentrennung durch Thermodiffusion.Zeits.f.Physik.Chemie, B44, 397. (1939)
- G.de Vahl Davis and I.P.Jones, "Natural Convection of Air in a Square Cavity: a Comparison Exercise". Int. J. Num. for Num. Meth. In Fluids, 3, 227-248.(1983).
- G. de Vhl Davis, "Natural Convection of Air in a Square Cavity: a Bench Mark Numerical Solution". Int. J. Num. for Num. Meth. In Fluids, 3, 249-264.(1983).
- D.W.Peaceman and H.H.Rachford."The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations". J.Soc.Ind.Appl. Math., 3(1), 28-41.(1995).